

Resumen

El estudio del funcionamiento de proteínas como la β -lactoglobulina, es fundamental para su eficiente uso en la biotecnología. El docking es una herramienta de bajo costo económico y computacional de amplio uso que carece de una metodología universal. Por ello, estudios exploratorios son indispensables para conocer y mejorar su desempeño. Dichos estudios permitirán acelerar, reducir costos y riesgos ligados al trabajo experimental de laboratorio. En este proyecto seguimos tres pasos:

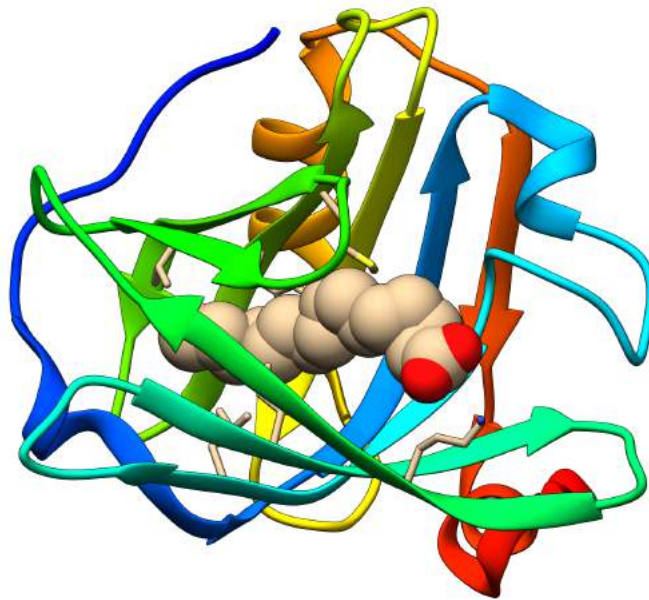


Figura 1. Estructuras de β -lactoglobulina (BLG) 1GXA. Estructura terciaria de la BLG con una molécula de ácido palmítico en el cáliz.

1) creación de una base de datos con modelos 3D de ácidos grasos y vitaminas liposolubles 2) probar y documentar métodos de docking basados en Vina y UCSF Dock6 sobre la β -lactoglobulina (BLG) con 10 distintos ligandos. 3) estandarización del procedimiento para posteriormente grabarlo como forma de video tutorial en línea. Los resultados muestran que el docking con Vina tiene el mejor desempeño y replicación de los resultados experimentales.

Palabras clave: BLG, docking, Vina, Dock6, Chimera, energía de afinidad.