



TÍTULO DEL TRABAJO

Nombre completo de los autores Adscripción de los autores Correo electrónico del autor que realizará la presentación

Resumen de 200 palabras con las siguientes características: Times New Roman; tamaño de letra 12; interlineado 1.15; espacio 0.

Notas:

- 1. El nombre del autor que presentará el trabajo debe estar subrayado.
- 2. El título, el nombre y adscripción de autores, resumen y referencias deben ocupar una página máximo.
- 3. El comité organizador evaluará el tipo de presentación, esto dependerá de la cantidad de trabajos enviados.

Referencias: Formato libre, puede ser Vancouver, Mendeley, etc.
Nombre completo del profesor responsable o tutor, según sea el caso
Modalidad de presentación: Oral; Cartel
UEA, Proyecto Terminal o Servicio Social:

V Simposio de la Licenciatura en Biología Molecular
Departamento de Ciencias Naturales
Universidad Autónoma Metropolitana, Unidad Cuajimalpa
Ciudad de México
29 y 30 de Septiembre de 2016





SIMULACIÓN DEL PLEGAMIENTO DE SECUENCIAS HP EN UN MEDIO NO HOMOGÉNEO

J. S. Hernández Fragoso¹, S. J. Alas Guardado, ¹ P. P. González Pérez²

¹Departamento de Ciencias Naturales, Universidad Autónoma Metropolitana Cuajimalpa; Ciudad de México.

²Departamento de Matemáticas Aplicadas y Sistemas, Universidad Autónoma Metropolitana Cuajimalpa; Ciudad de México.

hernandezsaulito@yahoo.com.mx

El estudio computacional del fenómeno del plegamiento de proteínas es un tema fundamental en la biología molecular. Se sabe que el plegado de proteínas dentro de las células se lleva a cabo en un ambiente no homogéneo, tortuoso y correlacionado. Por tanto, es importante incluir en los estudios teóricos y computacionales el medio en donde el plegamiento de las proteínas se desarrollan. En este trabajo se presenta la combinación de tres modelos que imitan este fenómeno dentro de un espacio no homogéneo y correlacionado. Se utiliza el modelo de grano grueso hidrófobo-polar (HP) con un arreglo cuadrado en 2D para imitar las cadenas proteicas. También, se usa el modelo dual de sitios y enlaces (DSBM) para crear diferentes tipos de redes no homogéneas en 2D, las cuales simulan el ambiente en donde las cadenas HP son plegadas. Por último, para llevar a cabo el plegamiento de las cadenas HP se utiliza un algoritmo evolutivo (EA). En particular, se hace el análisis del plegamiento de una secuencia HP como punto de referencia, en donde se muestra que el medio no homogéneo, con una longitud de correlación y una dimensión fractal dada, juega un papel importante para plegar correctamente esta secuencia, mientras que sobre un espacio homogéneo este plegado no ocurre.

Referencias:

- 1. van den Berg, B., Ellis, R. J., Dobson, C. M. Effects of macromolecular crowding on protein folding and aggregation. *EMBO J.* **18** (24), 6927–6933 (1999).
- 2. Hidalgo-Olguín, D. R., Cruz-Vázquez, R. O., Alas-Guardado, S. J., Domínguez-Ortiz, A. Lacunarity of classical site percolation spanning clusters built on correlated square lattices. *Transport Porous Med.* **107** (3), 717–729 (2015).
- 3. Unger, R., Moult, J. Genetic algorithms for protein folding simulation. *J. Mol. Biol.* **231**, 75–81 (1993).





Profesor responsable: Dr. Salomón de Jesús Alas Guardado
Modalidad de presentación: OralX ; Cartel
Servicio Social: Análisis, diseño e implementación de una plataforma bioinformática para e estudio del plegamiento de proteínas en espacios no homogéneos.