

1. Record Nr.	UNINA9910574875003321
Autore	Rojas Álvarez Oscar Eduardo
Titolo	Interacciones intermoleculares de la proteína de membrana ArfGTP con potasio y glicerol, componentes mayoritarios de la vinaza de caña de azúcar
Pubbl/distr/stampa	Colombia, : Universidad Santiago de Cali, 2018
Descrizione fisica	1 electronic resource (47-92 p.)
Disciplina	628.16
Soggetti	Pollution control Colombia
Lingua di pubblicazione	Spagnolo
Formato	Materiale a stampa
Livello bibliografico	Monografia
Sommario/riassunto	<p>La vinaza de caña de azúcar, al ser un residuo producido en altas cantidades derivado de los procesos industriales para la producción de Etanol, es una mezcla de compuestos que tiene una utilidad cíclica para matrices de suelos debido a su composición natural e industrial que recaen en las ventajas y desventajas de sus aplicaciones. El potasio y el glicerol, compuestos mayoritarios en su composición, son ligandos que ayudan a la conformación de complejos proteicos con la vinaza para tener alternativas en los usos industriales como aditivos para alimento animal y fertilizantes en matrices de suelos, muchos de estos, utilizados en cultivos de las mismas industrias. Estudios de química computacional permiten conocer propiedades intermoleculares entre la vinaza, el glicerol y el potasio mediante interacciones moleculares estables convirtiéndola en una herramienta útil de evaluación de dichas propiedades y determinación de nuevas alternativas para usos industriales de este residuo. En esta investigación, se evaluó la dinámica de las interacciones intermoleculares entre el modelo proteínico tridimensional extraído del archivo de la base de datos de proteínas (PDB) por sus siglas en inglés, del modelo (2KSQ), el cual consiste en una proteína de membrana de la Echoli llamado Arf*GTP, con dos ligandos como</p>

potasio y glicerol mediante dinámica molecular utilizando un software llamado Dinámica Molecular Escalable por sus siglas en inglés, NAMD1. Se observaron y evaluaron las interacciones intermoleculares por medio del soft-ware llamado Visor de Dinámica Molecular por sus siglas en inglés, VMD2 de la molécula modelada de la proteína de membrana Arf*GTP con componentes mayoritarios, tales como, el potasio y el glicerol en un ambiente solvatado definido e implícito de modelo de caja de agua (TIP3) con el fin de identificar y caracterizar las fuerzas intermoleculares, equilibrio en trayectorias, fluctuaciones atómicas, afinidades, constantes de velocidad e interacciones Arf*GTP-Potasio, Arf*GTP-Glicerol y Arf*GTP-Potasio-Glicerol en el contexto de usos industriales de la vinaza como alimento animal y fertilizantes. Finalmente, se observó que los tres complejos Arf*GTP se ven favorecidos por afinidades posicionales de los ligandos como los aminoácidos GLN 155, para el caso del potasio, y para los gliceroles lo fueron GLY 27 y LYS 127, como también, apantallamientos de algunos átomos de los aminoácidos con los ligandos. Con esta investigación, se busca tener más información acerca de las interacciones intermoleculares y constantes de velocidad, equilibrio de trayectorias y afinidades químicas de la proteína de membrana Arf*GTP con otros ligandos orgánicos e inorgánicos que aporten nuevas alternativas industriales para el uso de la vinaza de caña de azúcar.
