

Seminario ICTS: Modelación in silico de Receptores Acoplados a Proteínas G

- Actualizado (23.11.2010)

Título: Modelación in silico de Receptores Acoplados a Proteínas G: optimización y automatización de protocolos de DM para los monómeros y dímeros en membranas lipídicas.

Ponente: Leonardo Mokarzel Falcón. Instituto de Investigaciones en Fruticultura Tropical, Playa, La Habana, Cuba.

Fecha: Miércoles 24 de noviembre a las 12:00 h , sala de presentaciones del CESGA.

Este seminario forma parte de la serie de seminarios públicos que se realizan durante las estancias de investigación que se realizan en el CESGA, otorgadas en el marco de la convocatoria de accesos a ICTS-CESGA para el año 2010 y financiadas por el MICINN (referencia ICTS-2009-40).

Resumen: El trabajo que se presentará está enmarcado en el proyecto: "Creación de una plataforma de bioinformática estructural de GPCRs: Aplicaciones al estudio de mutaciones y nuevas estrategias para el cribado virtual de sus ligandos". En él se ha trabajado en dos aspectos principales. En primer lugar se realizó la modelación y la simulación, mediante dinámica molecular, de un nuevo receptor, cuya estructura fue publicada recientemente en el Protein Data Bank (PDB). Se trata en particular del receptor de quimioquinas CXCR4, el cual juega un papel esencial en la migración celular, en el contexto de la vigilancia inmunológica, así como en los procesos inflamatorios y el desarrollo celular. Se ha demostrado que este GPCR se encuentra vinculado estrechamente con las etapas tempranas del proceso de infección del VIH, en los linfocitos, así como con el mecanismo de proliferación y metástasis de células cancerígenas. En este sentido, se realizó además la modelación y simulación del heterodímero formado por los receptores A2A de adenosina y el receptor de dopamina D2, el cual se presenta como una alternativa interesante para el tratamiento del Parkinson y el desarrollo de toda una nueva generación de fármacos anti-psicóticos. El segundo aspecto abordado durante la presente estancia, fue la implementación de un programa, escrito en Python, que permitiese automatizar un protocolo de dinámica molecular existente, basado en el campo de fuerza GROMACS, para su integración en el servidor de modelación del grupo de Bioinformática Estructural de la Fundación Pública Gallega de Medicina Genómica. Se presentan los resultados obtenidos en ambas líneas de trabajo, así como las proyecciones futuras.