

Área temática: Algas Nocivas y Tóxicas

EVALUACIÓN DE LA AFINIDAD DE LAS TOXINAS PARALIZANTES CON EL CANAL DE POTASIO hERG (Kv11.1) *in silico*

Norma Estrada^{1*}, Andrés Tirado², Elena Castro¹

¹Centro de Investigaciones Biológicas del Noroeste, S.C. Km 1 Carretera a San Juan de La Costa, El Comitán. La Paz, Baja California Sur, 23205, México.

²Instituto Tecnológico de Durango, Blvd. Felipe Pescador 1830, Nueva Vizcaya, Durango, Durango, 34080, México.

(*Autor de correspondencia: nestrada@cibnor.mx)

RESUMEN

Las toxinas paralizantes (TP) son producidas por dinoflagelados marinos y se han descrito más de 50 análogos de estas toxinas. La estructura básica es una trialquil tetrahidropurina con una acción bloqueante, reversible y altamente específica de los canales de sodio dependientes de voltaje en membranas excitables produciendo parálisis en vertebrados, y esta especificidad ha permitido que las TP sean evaluadas con fines terapéuticos. Las TP pueden tener otros sitios de acción como los canales de potasio dependientes de voltaje (Kv). Una forma de evaluar la afinidad entre las TP y los canales Kv, es el acoplamiento molecular (docking) entre proteínas y ligandos usando programas computacionales *in silico*, que permiten conocer la conformación e interacciones entre ellos. El objetivo fue evaluar la afinidad de las TP con el canal Kv11.1 (hERG) *in silico*. Se modelaron los análogos de las TP, por medio del programa Avogadro v.1.2.0, se optimizaron los ángulos y distancias entre enlaces por medio de la función de campo de fuerza universal UFF. La estructura tridimensional del canal Kv11.1 (PDB código 5VA3) se obtuvo de la base de datos del NCBI-Protein Data Bank. Se modeló la estructura del canal Kv11.1, se identificaron los sitios de unión de superficie, se realizó el acoplamiento con las TP y la afinidad de las TP con el canal Kv11.1 utilizando el programa bioinformático Molegro Virtual Docker. Los análogos con una mayor afinidad fueron las toxinas B1, C2 y C3, las cuales pertenecen al grupo de las toxinas N-sulfocarbamoyl, siendo la toxina B1 el análogo que presenta una mayor afinidad por el canal kv11.1. Las toxinas N-sulfocarbamoyl son importantes para realizar la búsqueda de nuevos productos terapéuticos ya que presentan afinidad con el sensor de voltaje de los canales Kv, de gran importancia en la apertura y cierre de estos canales.

Palabras clave: toxinas paralizantes, canal de potasio Kv11.1, acoplamiento molecular.

Open Access: This abstract is distributed under the terms of the Creative Commons Attribution License (CC-BY 4.0) which permits any use, distribution, and reproduction in any medium, provided the original author(s) and the source are credited.