

## **Estudio de la unión de ATP y bicarbonato a hemoglobinas animales**

*Tutores:* Dra. Luciana Capece y Dr. Federico Issoglio

Es sabido que la unión de ATP modula negativamente la afinidad de oxígeno de las hemoglobinas de una variedad de especies animales. Sin embargo, existen especies adaptadas a tener que soportar episodios de escasez de oxígeno, como los cocodrilos, que han perdido la habilidad de unir ATP y han desarrollado en cambio la capacidad de unir iones bicarbonato.

En este plan de laboratorio de química nos proponemos analizar estructural y termodinámicamente la unión de ambos ligandos a hemoglobina humana y de cocodrilo, empleando estrategias de simulación computacional clásica. Cabe mencionar que este trabajo se realiza en colaboración con el grupo del Prof. Storz, de la Universidad de Nebraska, que estudia este fenómeno del punto de vista experimental por su interés evolutivo.

Se espera que el o la estudiante involucrada adquiera familiarización con las estrategias de simulación computacional, específicamente aquellas que emplean potenciales clásicos, puedan analizar propiedades estructurales, dinámicas y termodinámicas a partir de las mismas, y correlacionarlas con experimentos.