

"Adsorción y protonación de péptidos y proteínas en geles con respuesta al pH: Simulaciones por computadora."

Gabriel S. Longo

Instituto de Investigaciones Fisicoquímicas Teóricas y Aplicadas (INIFTA)

Resumen

Existe un gran interés en el uso farmacológico de péptidos y proteínas. Las proteínas juegan un papel esencial en la mayoría de los procesos biológicos, teniendo alta especificidad y baja toxicidad. Sin embargo, la eficiente administración de proteínas funcionales es un importante desafío en la investigación biomédica actual. La vía oral es generalmente deseada ya que es menos invasiva. De hecho, la mayoría de los fármacos en el mercado basados en moléculas pequeñas son administrados oralmente. Por el contrario, y debido a los mecanismos naturales que favorecen la digestión de las proteínas, la administración oral de proteínas sin un medio de protección resulta muy poco eficiente. Como resultado, los péptidos y proteínas terapéuticos son generalmente administrados a través de inyecciones. Para evadir estas barreras gastrointestinales algunos investigadores han considerado los hidrogeles poliméricos con respuesta al pH como vehículos funcionales para la administración oral. En esta charla, utilizando resultados recientes de Mecánica Estadística y simulaciones por computadora, se discutirán los mecanismos físicos y químicos que contribuyen a la adsorción de proteínas en hidrogeles sensibles al pH. El proceso de adsorción modifica de manera notable y no trivial el estado de protonación de los diferentes residuos aminoácidos, así como también el estado de carga de la red polimérica que forma el gel. Entender estos mecanismos contribuirá al diseño racional de biomateriales funcionales que aprovechen el control externo de la respuesta del material, particularmente a cambios del pH de la solución, para optimizar la administración de proteínas.