

Determinantes estructurales de la reactividad en peroxidasas

Tutora: Dra. María Ana Castro

Las peroxidasas son hemoproteínas capaces de promover oxidaciones clave en contextos biológicos, ambientales e industriales. Conocer cómo su arquitectura molecular regula la entrada y el reconocimiento de especies oxidantes resulta decisivo para mejorar su desempeño y expandir su campo de aplicación. Esta propuesta se centra en desentrañar los determinantes estructurales que controlan dicho proceso en peroxidasas modelo mediante un enfoque multiescala que combina simulaciones de dinámica molecular, análisis de túneles de acceso al centro activo y cálculos híbrido-cuántico/clásico de los primeros pasos catalíticos.

El trabajo abordará el caso particular de las peroxidasas decolorantes bacterianas (DyP), reconocidas por su notable estabilidad y por rutas de activación alternativas frente a distintos reactivos redox. Los resultados ofrecerán una base racional para interpretar fenómenos de activación no convencionales, orientar el diseño de variantes con reactividad dirigida y contribuir al desarrollo de biocatalizadores más eficaces en tecnologías sostenibles de remediación y transformación de biomasa, al tiempo que fortalecerán la formación de recursos humanos en modelado de sistemas biomoleculares complejos.