



Diseño *in silico* de péptidos antimicrobianos, con base en los parámetros fisicoquímicos y estructurales de los péptidos y de la membrana de la bacteria contra la cual se desea mostrar actividad antimicrobiana

Pedro Alejandro Fong Coronado 

Posgrado en Ciencias (Microbiología), Centro de Investigaciones en Ciencias Microbiológicas, Instituto de Ciencias, Benemérita Universidad Autónoma de Puebla.

*pedro_fong@hotmail.com

<http://doi.org/10.5281/zenodo.15067039>

Sesión 240

Fecha de publicación: 18 de diciembre de 2024

Editado por: Jesús Muñoz-Rojas (Instituto de Ciencias, BUAP).

Revisado por: Verónica Quintero Hernández (CONAHCyT, Instituto de Ciencias, BUAP).

Resumen

En este curso se enseñará a obtener mutantes a partir de una secuencia peptídica, mediante mutagénesis sitio-dirigida *in silico*. Se medirán parámetros fisicoquímicos relevantes de las mutantes propuestas: carga neta en cadena lateral, momento y vector del momento hidrofóbico, potencial electrostático, masa molecular, radio hidrofóbico, ángulo entre la cara hidrofóbica, momento dipolar y GRAVY. Y se cuantificarán parámetros estructurales como: flexibilidad intrínseca y normalizada de cada variante. Se utilizará el servidor PEP- FOLD 3.0 [1], para predecir la estructura tridimensional

y generar modelos peptídicos flexibilizados de la(s) mutante(s) [2], se realizará la predicción de la estructura tridimensional ab initio utilizando el algoritmo de inteligencia artificial AlphaFold 2.0 [3].

Palabras clave: Péptidos; mutagénesis *in silico*; potencial electrostático; estructura tridimensional; modelos peptídicos.

<https://sites.google.com/view/apcmac/cursos-apcm/cursos-2024/dise%C3%B1o-in-silico-de-p%C3%A9ptidos-antimicrobianos-con-base-en-los-par%C3%A1metros/resumen-del-curso-dise%C3%B1o-in-silico>

Referencias

[1]. Lamiable A, Thévenet P, Rey J, Vavrusa M, Derreumaux P, Tufféry P. PEP-FOLD3: faster de novo structure prediction for linear peptides in solution and in complex. *Nucleic Acids Research*. 2016 Jul 8;44(W1):W449-454. Disponible en: <https://doi.org/10.1093/nar/gkw329>

[2]. Maupetit J, Derreumaux P, Tuffery P. PEP-FOLD: an online resource for de novo peptide structure prediction. *Nucleic Acids Research*. 2009 May 11;37:W498-503. Disponible en: <https://doi.org/10.1093/nar/gkp323>

[3]. Varadi M, Velankar S. The impact of AlphaFold Protein Structure Database on the fields of life sciences. *PROTEOMICS*. 2022 Nov 16;23(17):2200128. Disponible en: <https://doi.org/10.1002/pmic.202200128>