

Aplicación de la homología de persistencia al análisis estructural de proteínas

Content

La relación entre la estructura molecular y la actividad biológica constituye un tema central en biofísica, especialmente para moléculas con efectos farmacológicos o tóxicos, como los venenos de serpientes. En este trabajo se explora la aplicación de homología persistente, una herramienta del Análisis Topológico de Datos (TDA), para caracterizar de manera cuantitativa la topología de proteínas tóxicas y correlacionar sus propiedades estructurales con su actividad biológica. Se analizaron estructuras cristalográficas y modelos tridimensionales de diversas toxinas de veneno de serpiente, generando complejos simpliciales a partir de las posiciones de aminoácidos y calculando diagramas de persistencia en dimensiones cero (H_0), uno (H_1) y dos (H_2). Esta metodología permite identificar características topológicas persistentes que reflejan interacciones críticas, cavidades funcionales y puentes estructurales relevantes para la unión a receptores y la actividad tóxica. Los resultados muestran que ciertos patrones topológicos persistentes se correlacionan con la potencia y especificidad de la actividad enzimática y neurotóxica, evidenciando que la homología persistente puede captar diferencias funcionales no evidentes mediante análisis estructural clásico. Además, este enfoque permite comparar múltiples toxinas y clasificar su actividad biológica de manera cuantitativa, abriendo la posibilidad de diseñar predictores de función basados en topología.

Tipo de presentación

Póster

Primary author(s) : Dr. BALDERAS, Alberto (UAEMex)

Presenter(s) : Dr. BALDERAS, Alberto (UAEMex)