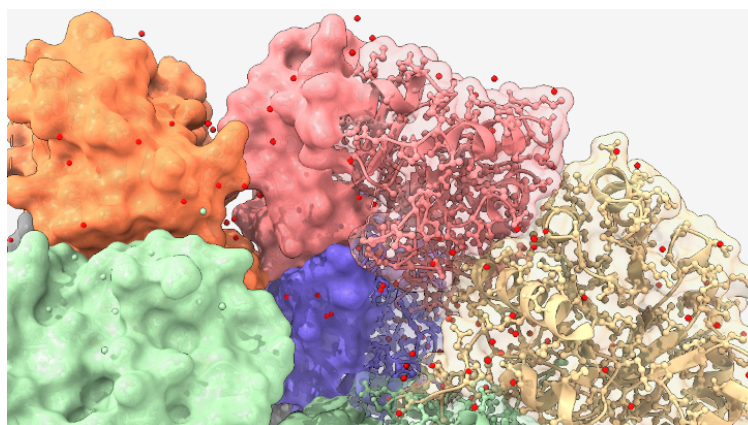


Divulga UAB

Revista de difusió de la recerca de la
Universitat Autònoma de Barcelona

04/06/2025

La superficie efectiva: una estrategia para desvelar la superficie de las proteínas



La superficie de las proteínas es irregular, diversa y está expuesta a los cambios del entorno, lo que complica su estudio. En el ICMAB proponen la "superficie efectiva": una medida del comportamiento de la proteína a través de una pequeña molécula aniónica, que permite mapear su superficie. Con la ayuda de técnicas computacionales, es una herramienta prometedora que permitiría visualizar las superficies con gran detalle y alta resolución.

La forma de una proteína no es un simple capricho: está determinada por el orden de sus aminoácidos, las fuerzas internas que la mantienen unida (como los enlaces de hidrógeno) y, sobre todo, por su estructura tridimensional, que depende del entorno en el que se encuentra. La forma que adopta está íntimamente relacionada con su función, ya que es lo que permite que interactúe con otras moléculas, como ocurre en procesos vitales del cuerpo.

Uno de los aspectos más importantes —y a la vez más difíciles de estudiar— es su superficie. Aunque solemos imaginarla lisa y uniforme, la realidad es muy diferente: la superficie de una proteína es irregular, con formas complejas y onduladas. Además, esta

superficie cambia dependiendo del entorno, como los iones y moléculas que la rodean, lo que complica aún más su estudio.

Tradicionalmente, visualizar una proteína en su estado natural sin modificarla ha sido un gran desafío. En nuestro estudio, proponemos una nueva forma de observarla: a través de lo que llamamos su "superficie efectiva", es decir, cómo se comporta realmente al interactuar con otras moléculas, especialmente el agua, como lo haría al unirse a receptores en una membrana celular.

Para lograr esto, usamos una pequeña molécula aniónica llamada $[\sigma\text{-COSAN}]^-$, que es muy estable y no altera la estructura de la proteína. Esta molécula actúa como una sonda que se une a partes específicas de la proteína y nos permite mapear su superficie mediante sencillas mediciones electroquímicas, sin necesidad de técnicas invasivas.

Gracias a esta estrategia, podemos identificar las regiones de la proteína que son más reactivas o que tienen mayor tendencia a interactuar con otras sustancias. Esta información es valiosa para muchas aplicaciones, desde el desarrollo de medicamentos hasta avances en biotecnología.

Lo más interesante es que $[\sigma\text{-COSAN}]^-$ "ve" cada proteína de forma distinta, lo que nos permite clasificarlas según las características únicas de su superficie. Así, esta molécula se convierte en una herramienta muy útil para estudiar proteínas en su estado natural.

Aunque este trabajo se llevó a cabo con experimentos de laboratorio, creemos que, con el apoyo de algoritmos y modelos computacionales adecuados, podríamos llegar a visualizar estas superficies con gran detalle y en alta resolución. Esto abriría nuevas puertas para la investigación científica y el diseño de terapias más precisas.

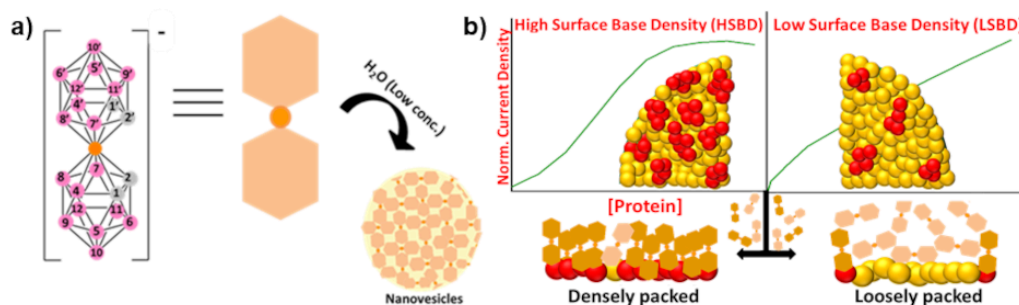


Figura 1. a) Representación esquemática del rotámero *cis*- $[\sigma\text{-COSAN}]^-$ con la numeración de sus vértices y su propiedad de formación de nano vesículas a baja concentración del rotámero en solución acuosa. b) Dos tipos distintivos de interacciones proteicas modelados en base a los residuos de aminoácidos básicos en la superficie de la proteína, utilizando la sonda aniónica de "pequeña molécula" $[\sigma\text{-COSAN}]^-$.

Francesc Teixidor, Clara Viñas

Institut de Ciència de Materials de Barcelona (ICMAB-CSIC)

Esfera UAB

teixidor@icmab.es, clara@icmab.es

Referencias

Xavier, J. A. M.; Fuentes, I.; Nuez-Martínez, M.; Viñas, C. & Teixidor, F. (2023). **Single stop analysis of a protein surface using molecular probe electrochemistry.** *Journal of*

Materials Chemistry B, 11, 8422-8432. <http://doi.org/10.1039/d3tb00816a>