

MEMÒRIA DEL TREBALL DE FI DE GRAU DEL GRAU (ESCI-UPF)

A novel computational workflow for elucidating key physico-chemical interactions involved in thermal resistance.

AUTOR/A: Alexis Molina Martínez de los Reyes

NIA: 103650

GRAU: Bachelor's Degree in Bioinformatics

CURS ACADÈMIC: 2019-2020

DATA: 22/06/2020

TUTOR/S: Victor Guallar

FULL DE RESUM DEL TREBALL DE FI DE GRAU DEL BDBI (ESCI-UPF)

TÍTOL DEL PROJECTE: A novel computational workflow for elucidating key physico-chemical interactions involved in thermal resistance.

AUTOR/A: Alexis Molina Martínez de los Reyes

NIA: 103650

CURS ACADÈMIC: 2019-2020

DATA: 22/06/2020

TUTOR/S: Victor Guallar.

PARAULES CLAU (mínim 3)

Català: termoestabilitat, dinàmica molecular, mutagènesi, xarxes d'interacció de residus, flexibilitat.

Castellà: termoestabilidad, dinámica molecular, mutagénesis, redes de interaccion de residuos, flexibilidad.

Anglès: thermostability, molecular dynamics, mutagenesis, residu interaction networks, flexibility.

RESUM DEL PROJECTE (extensió màxima: 100 paraules per llengua)

Català: La termoestabilitat es un concepte important en la indústria biotecnològica ja que juga un paper clau els processos enzimàtics i per tant, en la millora de la producció. En aquest estudi proposem un seguit d'anàlisis per l'estudi de la termoestabilitat i de la identificació de regions mutable en enzims fent ús de simulacions moleculars i xarxes d'interacció de residus. Agafant com a pilar central la hipòtesi que sosté a la flexibilitat com un agent rellevant en la estabilitat tèrmica de les proteïnes, els anàlisis desenvolupats han pogut elucidar regions claus de mutabilitat validades en dos estudis retrospectius.

Castellà: La termoestabilidad es un concepto importante en la industria biotecnológica ya que juega un papel clave en los procesos enzimáticos y en la mejora de la producción. En este estudio proponemos una serie de análisis para el estudio de la termoestabilidad y de la identificación de

regiones mutable en enzimas de fentús de simulaciones moleculares y de redes de interacción de residuos. Tomando como pilar central la hipótesis que sostiene a la flexibilidad como un agente relelevant a la estabilidad térmica de las proteínas, los análisis desarrollados han podido elucidar regiones claves de mutabilidad validadas en dos estudios retrospectivos.

Anglès: Protein thermostability is an important topic in industrial biotechnology since it plays a key role in the enzymatic process set-up, and thus, on enhanced production. We propose a pipeline, based on state-of-the-art methods, for studying thermostability and identifying mutable regions on enzymes using molecular simulations and residue interaction networks. Taking as a central pillar the hypothesis that flexibility plays a major role in resistance to thermal changes, the pipeline was built upon analyses able to reveal the most relevant regions in terms of stability of two different proteins in different retrospective studies.