



## DISEÑO Y DESARROLLO DE UN SIMULADOR PARA EL ESTUDIO DE LA UNIÓN COOPERATIVA BASADO EN EL MODELO DE HILL

Miguel Pérez Escalera<sup>1</sup>, Sheng-li Chilián Herrera<sup>1</sup>, Marleni Reyes Monreal<sup>1</sup>, Arturo Reyes Lazalde<sup>1</sup> y María Eugenia Pérez Bonilla<sup>1</sup>

<sup>1</sup> Benemérita Universidad Autónoma de Puebla. miguel.escalera@correo.buap.mx

Las proteínas transportadoras de oxígeno, como la hemoglobina, evolucionaron a partir de la mioglobina, proteína que cuenta con un solo sitio de unión para el oxígeno. Esta proteína presenta alta afinidad; tanto a valores pequeños de presión parcial de oxígeno ( $PO_2$ ), como a valores altos. En cambio, la hemoglobina se satura a altas concentraciones de  $PO_2$  y se disocia a bajas concentraciones. Esta característica se debe a la existencia de cuatro sitios de unión del oxígeno, denominado unión cooperativa. En moluscos y algunos artrópodos se encuentra la hemocianina que contiene cobre; en algunos invertebrados se encuentra la hemeritina que contiene hierro. En todos estos casos la unión es cooperativa. Lo mismo sucede en algunos procesos enzimáticos y en la unión de ligandos a proteínas de membrana celular.

Se diseñó y desarrolló un simulador interactivo en Visual Basic 6.0 para ambiente Windows®, desde XP a Windows 10. Está basado en la ecuación de Hill. Se implementaron tres módulos: (1) ecuación de Hill, (2) unión de oxígeno a mioglobina y (3) unión de oxígeno a la hemoglobina, donde el usuario puede modificar los valores de las variables respectivas.

El simulador cuenta con una interfaz que despliega el menú principal que da acceso a los simuladores. (I) Módulo de Hill: aborda el grado de saturación de una proteína en función de la concentración del ligando. El usuario ingresa el coeficiente de agregación, la constante de disociación y las moléculas de ligando. (II) Módulo mioglobina: las variables de ingreso son las concentraciones de mioglobina, oxígeno y constante de disociación. (III) Módulo hemoglobina: se ingresa la  $PO_2$ , la constante de disociación y el coeficiente de Hill.

Con los simuladores el usuario puede estudiar el proceso de unión cooperativa con ejemplos enzimáticos y con la saturación de la hemoglobina.