



CONSTRUCCIÓN DE TOPOLOGÍAS DE SISTEMAS DE DOS FASES ACUOSAS DE POLÍMEROS PARA DESCRIBIR SUS PROPIEDADES DE COEXISTENCIA

MARIANA BARCENAS CASTAÑEDA¹, MARÍA DE LA LUZ DELGADILLO TORRES², MIGUEL ÁNGEL VACA HERNÁNDEZ² y VÍCTOR AUGUSTO CASTELLANOS ESCAMILLA³

1 TECNOLÓGICO DE ESTUDIOS SUPERIORES DE ECATEPEC, 2 Tecnológico de Estudios Superiores de Ecatepec, 3 Tecnológico Nacional de México/Instituto Tecnológico de Tlalnepantla. m.barcenas.c@gmail.com

Recientemente se ha intensificado el uso de procesos de separación hacia las áreas biológicas, tanto para la producción como para el procesamiento de las biomoléculas en general. En particular la extracción líquido - líquido por sus características de operación permite conservar las propiedades de las biomoléculas, lo que la ha convertido en una herramienta potente, además es una operación con alta factibilidad de escalamiento a nivel industrial. El uso de sistemas de dos fases acuosas en una extracción líquido-líquido es adecuado para la separación y purificación de proteínas a partir de materiales como extractos de células, caldo de fermentación y filtrado de cultivo, y se han posicionado como una alternativa segura y óptima para la separación de biomoléculas. Todo proceso de separación requiere de información básica para su diseño, implementación y operación, tal como la descripción de los equilibrios de fases. La descripción de las propiedades de coexistencia desde el punto de vista experimental resultan costosos, por lo tanto el uso de modelos y teorías son un recurso viable. La simulación molecular, particularmente dinámica molecular, es una herramienta que permite describir la coexistencia de fases de sistemas complejos con base en sus características moleculares. Sin embargo, para desarrollar los estudios de dinámica molecular se requiere de la construcción y topología de los sistemas de estudio, siendo estos fundamentales para una predicción realista del comportamiento termodinámico de los sistemas. En el presente trabajo se construyeron las estructuras y topologías de sistemas modelo de dos fases acuosas de polímeros para la separación de proteínas (seleccionadas como representativas de familias de moléculas de origen biológico). Los sistemas de estudio están constituidos por polietilenglicol (PEG), maltodextrina (MD) y agua. Se construyeron sistemas modelo con diferentes concentraciones y pesos moleculares de polímero para emular los sistemas reales. Se utilizó el programa visual molecular dynamics para la construcción de las estructuras de los polímeros y el disolvente (agua). La construcción de la topología de los sistemas de estudio se llevó a cabo con GROMACS. Se prepararon topologías de siete sistemas, considerando los parámetros estructurales de los polímeros (longitudes de enlace, ángulos de enlace, ángulos diedros), en cajas de simulación rectangulares a diferentes concentraciones, utilizando agua como disolvente. La finalidad de la construcción de las topologías es utilizarlas para describir el equilibrio de fases con base en las características moleculares de los componentes que integran el sistema de estudio con el potencial "united atom force field", y así proporcionar la información suficiente para desarrollar un proceso de extracción líquido-líquido.