**Potencial electrostático alrededor y dentro de un complejo entre α-lactoalbúmina y cadenas de polielectrolito: un estudio mediante simulaciones de Monte Carlo.**

Torres P.B. (1), Baldor S. (2), Quiroga E. (3) , Ramirez-Pastor A.J. (3), Spelzini D. (2), Boeris V. (2), Narambuena C.F. (1).

(1) Grupo Bionanotecnología y sistemas complejos. INFAP-CONICET & Facultad Regional San Rafael, Universidad Tecnológica Nacional, Av. Justo José de Urquiza 314, San Rafael, Mendoza, Argentina

(2) Facultad de Ciencias Bioquímicas y Farmacéuticas, Universidad Nacional de Rosario, CONICET. Suipacha 531, Rosario, Santa Fe.

(3) Instituto de Física Aplicada, Universidad Nacional de San Luis. Chacabuco 917, Ciudad, San Luis.

Dirección de e-mail: [claudionarambuena@gmail.com](mailto:claudionarambuena@gmail.com)

RESUMEN

Las proteínas del suero lácteo son de gran importancia como ingredientes en la industria alimenticia alimentaria debido a sus propiedades funcionales. La fracción proteica del suero lácteo está compuesta principalmente por α-lactoalbúmina, β-lactoglobulina y glicomacropéptido. Estas proteínas tienen la capacidad de interactuar y formar complejos con polisacáridos ionizables.

El objetivo de este trabajo es estudiar el potencial electrostático alrededor y dentro de los complejos formados entre la α-lactoalbúmina y un polielectrolito considerando que este potencial es afectado por diferentes condiciones de pH y la presencia de sal. La metodología utilizada consistió en un modelo de grano grueso para la proteína y el polielectrolito (PE), luego se llevaron a cabo simulaciones por el método de Monte Carlo en un amplio rango de pH. Adicionalmente, se agregaron distintos tamaños de cadena de PE junto con distintas cantidades de dichas cadenas. El PE modelado fue considerado aniónico fuerte en todas las simulaciones.

Los resultados mostraron que la presencia del PE cargado negativamente afecta a la carga de la proteína en el rango de pH por debajo del punto isoeléctrico (pI ± 4.9). El incremento en la longitud de la cadena de PE genera un incremento de las cargas positivas de la proteína. Se cuantificó la adsorción del PE en la superficie de la proteína con un criterio estructural, el cual tiene en cuenta la formación de pares iónicos. Los perfiles de potencial electrostático son muy dependientes del pH de la solución.

Además, se observó que la proteína tiene una capacidad limitada para adsorber monómeros del PE, es decir, un incremento de la cantidad de monómeros de PE no produce un aumento en la formación de pares iónicos. Adicionalmente, se observó que para la menor concentración de sal estudiada se obtuvieron los valores de adsorción máximos.

Palabras Clave: proteínas, simulación, Monte Carlo, polielectrolitos.