



## Anexo V. Modelo de Memoria

### MEMORIA MOVING MINDS 2022

ISABEL LEGAZ PEREZ  
UNIVERSIDAD DE RENNES. FRANCIA

#### RESUMEN

El objetivo principal de la estancia fue el aprendizaje en el manejo de los distintos sistemas informáticos implicados en la caracterización funcional y molecular de los genes sobreexpresados en el cerebro postmortem de personas adictas al alcohol. Una vez caracterizados molecular y funcionalmente, las moléculas fueron analizadas con el software bioinformático (AutoDock Vina). En primer lugar aprendí a configurar los datos para continuar realizando un análisis de acoplamiento molecular de las principales moléculas significativas obtenidas previamente por nuestro grupo en la Universidad de Murcia. Durante la estancia me he centrado en una sola molécula de las 20 sobreexpresadas en los distintos núcleos cerebrales analizados (corteza prefrontal, un núcleo accumbens, amígdala basolateral y central. Se analizó las principales rutas metabólicas donde la proteína estaba implicada, observando que estaba relacionada con adhesiones focales ER 3.6042, pvalor. 0.00010220, FDR 0.0035180 y rutas de señalización de la insulina con los siguientes valores ER2.9558, pvalor. 0.000032374 y FDR 0.0035180. Posteriormente, se identifiqué el sitio de unión del ligando a la proteína sobreexpresada AKT, limitando el espacio de búsqueda sobre la superficie del receptor y así, minimizar los grados de libertad en la búsqueda. El software AutoDock Vina fue utilizada como herramienta de acoplamiento para la búsqueda y la predicción de poses. Se intentó identificar la función de puntuación, que permite distinguir entre las poses generadas, la mejor solución que coincida estrechamente con la pose real del acoplamiento. El algoritmo de búsqueda utilizado fue el de descriptor del sitio activo, donde coloca el ligando en el sitio activo mediante la comparación de descriptores. Haciendo uso de la herramienta AutoDock Tools fueron creados los ficheros de configuración. Se construyó una caja para cada uno de los complejos según las especificaciones. Se seleccionaron todas las poses en el conjunto de prueba, con 197 atributos y 1703 casos. Mediante los resultados preliminares que he podido obtener en este estudio vamos a poder conocer y describir sitios activos, mecanismos catalíticos, así como describir la acción de un fármaco y el diseño de nuevos compuestos inhibidores que permitan en un futuro ser probados en modelos murinos.



Marie-Laurence ABASQ  
Bureau International  
~~Faculté de Pharmacie~~

Stamp and Signature