

## Modelización molecular de $\beta$ -lactamasas y PBPs



Natalia Díaz Fernández

**Resumen:** Las técnicas de modelización molecular permiten analizar en detalle las reacciones que catalizan sistemas enzimáticos como las  $\beta$ -lactamasas y las PBPs. Mediante simulaciones de dinámica molecular de distintas configuraciones del centro activo seguidas de cálculos energéticos químico-cuánticos, es posible identificar qué residuo del centro activo actúa como catalizador básico, determinando de esta manera el mecanismo de reacción para la primera etapa del proceso catalizado por  $\beta$ -lactamasas y PBPs. A juzgar por los resultados obtenidos, la metodología utilizada en nuestros estudios podría ser muy útil en las etapas iniciales del diseño por ordenador de nuevos fármacos.