

Proyecto: Ingeniería de proteínas en aldo-ceto reductasas (AKRs) vegetales: diseño computacional y optimización catalítica para la mejora de la resiliencia al estrés y el flujo metabólico.

Investigador: Anselm Morell

Las aldo-ceto reductasas (AKRs) vegetales participan de forma clave en la detoxificación celular frente al estrés oxidativo y en la homeostasis de intermediarios metabólicos. Este proyecto combina diseño racional de proteínas y validación funcional *in planta* para optimizar la eficiencia catalítica de miembros clave de esta superfamilia.

Inicialmente, se emplearán herramientas bioinformáticas de modelado estructural y acoplamiento molecular para identificar residuos determinantes en el bolsillo catalítico y modular la afinidad hacia carbonilos reactivos derivados del estrés oxidativo y precursores biosintéticos. Las variantes candidatas se obtendrán mediante mutagénesis dirigida y se expresarán de forma heteróloga en *Escherichia coli* para su purificación. La funcionalidad de las isoformas optimizadas se validará mediante caracterización bioquímica, determinando sus parámetros cinéticos en estado estacionario (K_m , K_{cat} , K_{cat}/K_m) frente a un panel de sustratos diana. Finalmente, las variantes con mayor eficiencia catalítica se expresarán en un modelo vegetal (*Marchantia polymorpha*) mediante transformación mediada por *Agrobacterium tumefaciens*, con el fin de evaluar la adquisición de resiliencia a estreses abióticos y la modulación del perfil metabólico.

Información de contacto: anmog15@ibmcp.upv.es
<http://plasticity.ibmcp.csic.es/>