

**FACULTAD DE CIENCIAS DE LA SALUD**

Polanco, C., Buhse, T., Vizcaíno, G., & Levy, J. (2017). *The polar profile of ancient proteins: a computational extrapolation from prebiotics to paleobiochemistry*. Acta Biochimica Polonica, 64(1), pp. 117-122.

**Resumen.** Este artículo aborda el perfil polar de las proteínas ancestrales utilizando un estudio comparativo de aminoácidos encontrados en conchas de 25, 000, 000 años de antigüedad descritas en el trabajo de Abelson.

Simulamos el perfil polar con una plataforma informática que representaba un modelo evolutivo simplificado computacional que imitaba la generación de pequeñas proteínas a partir de un conjunto de aminoácidos monoméricos y que incluía varias propiedades dinámicas, como la autorreplicación y la fragmentación-recombinación de las proteínas. Las simulaciones se tomaron hasta 15 generaciones y produjeron un número considerable de proteínas de 25 aminoácidos de longitud. El modelo computacional incluyó los aminoácidos encontrados en las conchas ancestrales, el factor de degradación térmica, y la abundancia relativa de los aminoácidos observados en la simulación experimental Miller-Urey de la formación de aminoácidos prebióticos. Encontramos que los perfiles polares de aminoácidos de las conchas ancestrales y aquellos simulados y extrapolados de las abundancias de Miller-Urey son coincidentes.

**Abstract.** This paper addresses the polar profile of ancient proteins using a comparative study of amino acids found in 25000000-year-old shells described in Abelson's work.

We simulated the polar profile with a computer platform that represented an evolutionary computational toy model that mimicked the generation of small proteins starting from a pool of monomeric amino acids and that included several dynamic properties, such as self-

replication and fragmentation-recombination of the proteins. The simulations were taken up to 15 generations and produced a considerable number of proteins of 25 amino acids in length. The computational model included the amino acids found in the ancient shells, the thermal degradation factor, and the relative abundance of the amino acids observed in the Miller-Urey experimental simulation of the prebiotic amino acid formation. We found that the amino acid polar profiles of the ancient shells and those simulated and extrapolated from the Miller-Urey abundances are coincident.