

ISBN: 978-987-754-185-4



UNIVERSIDAD
NACIONAL
DE TUCUMÁN

naifq

ASOCIACIÓN ARGENTINA DE
INVESTIGACIÓN EN FÍSICOQUÍMICA
Personería Jurídica 2048

XXI CONGRESO ARGENTINO
DE FÍSICOQUÍMICA Y
QUÍMICA INORGÁNICA

LIBRO DE RESÚMENES



TUCUMÁN
ARGENTINA

XXI Congreso Argentino de Fisicoquímica y Química Inorgánica / Carlos Della Védova ... [et al.] ;
compilado por Aída Ben Altabef ; Mónica Mercedes Vergara ; Sonia B. Díaz ;
editado
por Aída Ben Altabef ; Mónica Mercedes Vergara ; Sonia B. Díaz. - 1a ed . - San Miguel
de Tucumán : Universidad Nacional de Tucumán. Facultad de Bioquímica Química
y
Farmacia, 2019.
Libro digital, PDF

Archivo Digital: descarga y online
ISBN 978-987-754-185-4

1. Química Inorgánica. 2. Nanotecnología. 3. Fotoquímica. I. Della Védova, Carlos
II. Ben Altabef, Aída, comp. III. Vergara, Mónica Mercedes, comp. IV. Díaz, Sonia
B., comp. V. Ben Altabef, Aída, ed. VI. Vergara, Mónica Mercedes, ed. VII. Díaz,
Sonia B., ed.
CDD 540.711

XXI CONGRESO ARGENTINO DE FISICOQUIMICA Y QUIMICA INORGÁNICA

14 al 17 de abril de 2019, Tucumán, Argentina.

Aída Ben Altabef ; Mónica Mercedes Vergara y Sonia B. Díaz (*Compiladores*)

ISBN: **978-987-754-185-4.**



XXI CONGRESO ARGENTINO DE FISIQUÍMICA Y QUÍMICA INORGÁNICA TUCUMÁN- ABRIL 2019

123 - TÉCNICAS COMBINADAS DM / QAIM UTILIZADAS PARA EVALUAR LAS INTERACCIONES LIGANDO-RECEPTOR. UN ESTUDIOS SOBRE 5 BLANCOS MOLECULARES CON DIFERENTES COMPLEJIDADES MOLECULARES.

Sebastián Rojas, Oscar Parravicini, Marcela Vettorazzi, Rodrigo Tosso, Adriana
Garro, Lucas Gutiérrez, Sebastián Andújar and Ricardo D. Enriz

Facultad de Química Bioquímica y Farmacia, Universidad Nacional de San Luis,
IMIBIO-SL CONICET
denriz@unsl.edu.ar

Introducción. Los métodos de docking más precisos requieren evaluar cambios conformacionales en el ligando y en el receptor. Existen muchos factores a considerar, pero los más relevantes son: ¿Cómo se mueven los átomos? El efecto del disolvente y del entorno biológico y también evaluar las diferentes interacciones moleculares que determinan la unión ligando-receptor (L-R). Este estudio enfatiza que QAIM se basa en analizar las interacciones moleculares que estabilizan o desestabilizan los complejos L-R y que esta teoría proporciona un vínculo inteligible entre el experimento y la teoría. En este trabajo informamos un estudio comparativo de una técnica híbrida DM / QAIM utilizada en cinco objetivos moleculares con diferentes grados de complejidad estructural. Los sistemas biológicos seleccionados son: acetilcolinesterasa (AChE), receptor D2 de dopamina (D2DR), beta secretasa (BACE1), dihidrofolato reductasa (DHFR) y esfingosina quinasa (SphK1).

Resultados y discusión. Si el objetivo del estudio es solamente diferenciar entre compuestos fuertemente activos de compuestos débilmente activos o inactivos, entonces las simulaciones utilizando técnicas simples como estudios de docking o simulaciones de DM pueden ser suficientes para obtener esa información. Esto es válido para blancos moleculares simples en nuestro estudio AChE y D2DR. Es diferente el caso si estamos interesados en poder explicar los diferentes comportamientos de ligandos con afinidades similares o si es importante comprender en detalle las diferentes interacciones moleculares que están estabilizando o desestabilizando la formación del complejo L-R. Nuestros resultados muestran que en este caso, es necesario incluir cálculos mecánicos cuánticos, por ejemplo, métodos híbridos, simulaciones MD / cálculos QAIM. Incluso en el caso del sistema molecular más complejo aquí estudiado (SphK1), fue necesario extender las simulaciones de DM y hacer clusterizaciones además de los cálculos cuánticos para poder obtener correlación entre los cálculos y los datos experimentales. Nuestros resultados demuestran que los cálculos QAIM son muy útiles y sus principales contribuciones son a) que es posible obtener información precisa sobre la fuerza de las interacciones moleculares que estabilizan los distintos complejos L-R, b) se obtienen mejores correlaciones con los datos experimentales y c) es posible determinar qué partes del ligando se deben modificar para aumentar la afinidad con la diana molecular. Esta información es esencial para el diseño de nuevas moléculas.