



TOPOLOGÍA DEL POTENCIAL ELECTROSTÁTICO MOLECULAR EN INTERACCIONES DE APILAMIENTO.

Sigfrido Escalante-Tovar¹, Araceli Tovar¹, Lena Ruiz Azuara¹

¹Facultad de Química, UNAM; México

e-mail: sigfrido@unam.mx

Este trabajo tiene como objetivo el estudio de las características topológicas del potencial electrostático molecular (MEP) de un conjunto de Casiopeínas®¹ como posible base de un criterio de selección de candidatos para interacciones de apilamiento con bases de los ácidos nucleicos. En este trabajo se analiza específicamente el apilamiento con la adenina.

La cantidad, distribución espacial y tipos de puntos críticos presentes en el MEP revela diferencias importantes en moléculas que por su estructura podrían considerarse análogas entre sí pero que no lo son, al menos, electrostáticamente hablando.² Los valores del MEP en algunos puntos críticos revelan también diferencias notables. El estudio se realizó por medio de cálculos DFT usando el programa deMon2k.³ Se calcularon complejos mixtos de cobre del tipo: $[\text{Cu}(\text{N}-\text{N})(\text{O}-\text{O})]^+$, $[\text{Cu}(\text{N}-\text{N})(\text{N}-\text{O})]^+$. Los ligantes tipo (N-N) fueron fenantrolinas y bipyridinas sustituidas. Los de tipo (O-O) fueron acetilacetato y salicilaldehidato. El ligante tipo (N-O) fue el ion glicinato. Se calculó también otro intercalador: el bromuro de etidio como referente.

El estudio reveló con claridad algunas diferencias importantes entre las familias de complejos estudiados. Por ejemplo: la ausencia de puntos críticos fuera del plano molecular en los complejos con glicinato va asociada con superficies lisas en el MEP lo que significa pocas variaciones topológicas de este campo en estos compuestos y bajos valores de éste. Por el contrario, los complejos con acetilacetato producen superficies con valores mayores del MEP en regiones en donde hay evidencia de apilamiento con adenina. Estas regiones, a diferencia de los complejos con glicinato, contienen puntos críticos fuera del plano molecular. Los complejos con salicilaldehidato presentan características topológicas intermedias. A la fecha, no se dispone aún de estudios experimentales de estructuras Casiopeínas-DNA que permitan contrastar nuestros resultados.

Referencias:

- (1) García-Ramos, J. C., Galindo-Murillo, R., Cortés-Guzmán, F., Ruiz-Azuara, L. *Journal of the Mexican Chemical Society* **2013**, 57, 245-259.
- (2) Bader, R.F.W. *Atoms in Molecules. A Quantum Theory*; Oxford University Press: Oxford, 1990.
- (3) A.M. Koster, ...deMon2k, The deMon Developers 2005.
- (4) inVisu, Inc. <http://www.invisu.ca/e/index.php>.