



ANÁLISIS DE LA FORMACIÓN DE PUENTES DISULFUROS VECINALES

Juan Carlos Garduño¹, Nelly González-Rivas¹, Horacio Reyes¹
¹Centro Conjunto de Investigación en Química Sustentable UNAM-UAEMex
qijcgj@outlook.es

Los puentes disulfuros presentes en las proteínas del organismo regulan funciones como el envejecimiento celular y el desarrollo de enfermedades, dado que afectan algunos ciclos celulares, mientras que en las bacterias y los virus emplean los puentes disulfuro como llaves de entrada o salida de un compartimento celular a otro, las cuales están reguladas por la reacción de interconversión redox tiol-disulfuro que se ve influenciada por el potencial redox dentro de la célula, así como por efectos electrónicos y conformacionales de la estructura dentro del organismo.

Existen diversos tipos de puentes disulfuro en las proteínas, un caso particular son los puentes disulfuros prohibidos que participan en procesos como la coagulación de la sangre, control de epitopos, uniones a zinc, etc. Los puentes disulfuro vecinales son un tipo especial de disulfuros prohibidos, que se forman entre cisteínas adyacentes. Sobre estos se sabe poco acerca de su comportamiento químico dentro del organismo debido a que rompen las reglas establecidas acerca de la formación de puentes disulfuro.

En el presente trabajo se reporta una investigación acerca de los puentes disulfuro vecinales, para tratar de comprender el origen de su formación por medio de la química computacional empleando Teoría Funcional de la Densidad (DFT). Se estudia la reacción tioles-disulfuro, estudiando los parámetros: potencial electrostático, energías de reacción e índices de reactividad.

Referencias:

1. Aran M. Rev. Quim. V. (2009), 8, 162-184.
2. Thornton J. J. Mol. Biol. (1981), 151, 261-287.
3. Ragsdale W. Ant. Red. Sig. (2011), 14, 1039-1047.