



USO DE LOS PARÁMETROS DE REACTIVIDAD QUÍMICA PARA ANALIZAR LA INFLUENCIA DE UN AMBIENTE ELECTROSTÁTICO EFECTIVO CRECIENTE SOBRE SITIOS ACTIVOS DE METALOENZIMAS

Mayra Lozano¹, Alfredo Guevara-García¹, Marcelo Galván¹

¹Departamento de Química, Universidad Autónoma Metropolitana-Iztapalapa. México, D.F.
e-mail: mlozanoespinoza@gmail.com

Con el fin de analizar los cambios en sitios activos de metaloenzimas debidos a la influencia de un ambiente peptídico creciente así como de la presencia de un potencial electrostático efectivo, se utilizaron los potenciales químicos generalizados y las funciones de Fukui condensadas como sensores de dichos efectos. Se utilizó el método de Kohn-Sham¹ espín polarizado para calcular las propiedades electrónicas de los sitios activos de las metaloenzimas hierro superóxido dismutasa (FeSOD) y manganeso superóxido dismutasa (MnSOD)²; se utilizó la aproximación OPBE³ al funcional de intercambio y correlación y los conjuntos de base wachters+f⁴ para Fe y Mn y 6-311G** para los átomos restantes. Los cálculos fueron hechos con el código NWChem⁵. El cálculo del potencial químico generalizado se realizó empleando una aproximación de diferencias finitas y el Teorema de Janak⁶, las funciones condensadas de Fukui se evaluaron utilizando el esquema de cargas de Mulliken⁷ y el de átomos en moléculas de Bader⁸. Los resultados muestran que tanto el potencial químico como las funciones de Fukui son sensibles a los tamaños de modelos truncados y a la presencia de cargas puntuales hasta distancias de 20.15 u.a. Estos resultados pueden ser de utilidad en el establecimiento del tamaño de la región cuántica en métodos tipo QM/MM.

Referencias

- 1 Kohn, W.; Sham, L. *Phys. Rev. A* **1965**, 140, 1133.
- 2 Perry, J.J.P.; Shin, D.S.; Getzoff, E.D.; Tainer, J.A. *Biochimica et Biophysica Acta* **2010**, 1804, 245.
- 3 Swart, M.; Ehlers, A.W.; Lammertsma, K. *Mol. Phys.* **2004**, 102, 2467.
- 4 Wachters, A.J.H. *Chem. Phys.* **1970**, 52, 1033.
- 5 Valiev, M.; Bylaska, E.J.; Govind, N.; Kowalski, K.; Straatsma, T.P.; Van Dam, H.J.J.; Wang, D.; Nieplocha, J.; Apra, E.; Windus, T.L.; de Jong, W. *Computer Physics Communications* **2010**, 181, 1477.
- 6 Janak, J. F. *Phys. Rev. B* **1978**, 18, 7165.
- 7 Mulliken, R.S. *Chem. Phys.* **1955**, 23, 1841.
- 8 Bader, R. F. W. *Atoms in Molecules - A Quantum Theory*, Oxford University Press, Oxford, 1990.