



## ESTUDIO TEÓRICO DE REACCIONES MEDIADAS POR COMPLEJOS TERNARIOS DE Cu (II)

Lillian Gisela Ramírez Palma<sup>1</sup>, Lena Ruiz Azuara<sup>2</sup>, Juan Carlos García Ramos<sup>1</sup>, Fernando Cortés Guzmán<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Instituto de Química, Universidad Nacional Autónoma de México, Circuito Exterior, Ciudad Universitaria, Del. Coyoacán, C.P. 04510, Ciudad de México; México.

<sup>2</sup>Facultad de Química, Universidad Nacional Autónoma de México, Circuito Exterior, Ciudad Universitaria, Del. Coyoacán, C.P. 04510, Ciudad de México; México.

e-mail: lila.gis.rp@gmail.com

Se llama Casiopeínas® a una familia de complejos de Cu (II) que ha sido estudiada en sistemas *in vitro* e *in vivo*, mostrando actividad antineoplásica, genotoxicidad y citotoxicidad.<sup>1</sup> El mecanismo de acción de estos compuestos no ha sido completamente elucidado; sin embargo, evidencias experimentales y estudios computacionales sugieren que su actividad se debe principalmente a dos factores: a) la capacidad redox del cobre que permite la generación de especies reactivas de oxígeno<sup>2</sup>, y b) la interacción directa de estos compuestos con el ADN, mediante la intercalación en el surco menor<sup>3</sup>.

El objetivo de este trabajo fue estudiar dos reacciones involucradas en el mecanismo de acción de éstos fármacos: 1) la reacción de formación de un enlace disulfuro en sistemas tipo tiol según la estequiometría propuesta por el grupo de investigación en Casiopeínas®, y 2) la reacción de hidrólisis de un enlace fosfodiéster a partir de la geometría del sitio de reconocimiento de los complejos. El trabajo fue realizado en el marco de la teoría de funcionales de la densidad y el análisis de las propiedades derivadas de la densidad electrónica, ayudando así al entendimiento del mecanismo de acción de estos compuestos.

### Referencias

- (1) (a) L. Ruiz-Azuara, *Mexican Patent*, **1993**, No. 172248; (b) L. Ruiz-Azuara, *Mexican Patent*, **1994**, No. 172967; (c) L. Ruiz-Azuara, *U.S. Patent No. 5*, **1997**, 107, 005, (d) L. Ruiz-Azuara, *U.S. Patent No. 5*, **1996**, 576, 326.
- (2) Bravo-Gómez, M. E.; García-Ramos, J. C.; Gracia-Mora, I.; Ruiz-Azuara, L. *J. Inorg. Biochem.* **2009**, *103* (2), 299–309.
- (3) Galindo-Murillo, R.; Ruíz-Azuara, L.; Moreno-Esparza, R.; Cortés-Guzmán, F. *Phys. Chem. Chem. Phys.* **2012**, *14* (44), 15539.