



Tautomerismo de análogos de nucleótidos para tratamiento anticancerígeno

Luis Rolando Mejía Mazariegos¹, Juvencio Robles García¹, Marco Antonio García Revilla¹

¹Departamento de Química; DCNE; Universidad de Guanajuato; México

e-mail: magarcia@ugto.mx

El tautomerismo ocurre en bases de ácidos nucleótidos y su estudio es fundamental para entender los mecanismos de mutación espontánea y estabilidad del ADN¹. Dicho tautomerismo sugiere la participación de bases no canónicas en la formación de pares de bases. En este trabajo estudiamos las propiedades electrónicas, geométricas, energéticas y cinéticas a lo largo de la superficie de energía potencial del equilibrio tautomérico de nucleótidos, para entender el posible rol de los tautómeros no canónicos en la actividad de los análogos de dichos nucleótidos en la replicación del ADN. En el presente trabajo se obtuvieron las barreras energéticas con el efecto del disolvente (agua) para dichos nucleótidos y sus análogos usando los niveles de teoría MP2/cc-aug-pVDZ y QCISD/cc-aug-pVDZ usando el software GAMESS² y GAUSSIAN09.³ Los resultados muestran que ambos tautómeros, los canónicos y no canónicos, coexisten formando pares de Watson-Crick (WC) y sus análogos no WC. Además, se estudió el papel de los enlaces por puente de hidrógeno en la estabilidad de dichos pares formados con bases canónicas y no canónicas utilizando la Teoría Cuántica de Átomos en Moléculas⁴ y el software AIMALL.⁵

1) Harris, V.H.; *et. al. Mol. Biol.* **2003**, 326, 1389-1401

2) Schmidt, M.W.; *et. al. J. Comput. Chem.* **1993**, 14, 1347-1363

3) Gaussian 09, Revision **D.01**, Frisch, M.J., *et.al. Gaussian Inc.* Wallingford CT 2009

4) Bader, R.F.W. *Atoms in Molecules*, 1st edn. International series of monographs on chemistry (Clarendon Press, United States, 1994)

5) Keith, T.A. AIMALL (Version 14.06.21). TK Gristmill Software, Overland Park KS, USA, 2014