



Modelado Computacional de Complejos de Cobre Relevantes en la Enfermedad de Alzheimer

Jorge Alí-Torres

Departamento de Química, Universidad Nacional de Colombia, Bogotá-Colombia

e-mail: jialit@unal.edu.co

Se ha mostrado que los cationes metálicos, tales como Cu^{2+} , inducen la agregación de péptidos amiloides y favorecen la formación de especies reactivas de oxígeno. En este sentido, la elucidación estructural de los complejos Cu^{2+} -Ab es esencial para entender su papel en la agregación del péptido Ab, en la formación de especies reactivas de oxígeno y para el diseño racional de nuevos agentes quelantes con potenciales aplicaciones terapéuticas. En la presente contribución revisaremos algunos de nuestros trabajos en este campo. En primer lugar, presentaremos las estrategias computacionales para determinar las estructuras tridimensionales de los complejos Cu^{2+} -Ab y sus propiedades redox [1,2]. En segundo lugar, mostraremos nuestros estudios computacionales en el papel y mecanismo de los complejos de Cu^{2+} -Ab en la formación de peróxido de hidrógeno [3,4]. Por último, mostraremos nuestros recientes avances en el diseño *in silico* de agentes quelantes de Cu^{2+} [5] y en marcadores para identificar la formación de placas amiloideas. [6]

Referencias:

- [1] Ali-Torres, J.; Marechal, J.-D.; Rodriguez-Santiago, L. and Sodupe, M. J. Am. Chem. Soc. 2011, 133 (38), 15008-15014.
- [2] Ali-Torres, J.; Mirats, A.; Marechal, J.-D.; Rodriguez-Santiago, L. and Sodupe, M. J. Phys. Chem.B. 2014, 118 (18), 4840-4850.
- [3] Mirats, A.; Ali-Torres, J.; Rodriguez-Santiago, L. Sodupe, M; and La Penna, G. Phys. Chem. Chem. Phys. 2015, 17 (41), 27270-27274.
- [4] Ali-Torres, J.; Mirats, A.; Rodriguez-Santiago, L. and Sodupe, M. Theor. Chem. Acc. 2016, 135 (5), 1-9.
- [5] Rimola, A.; Ali-Torres, J.; Rodriguez-Rodriguez, C.; Poater, J.; Matito, E.; Sola, M. and Sodupe, M. J. Phys. Chem. A. 2011, 115 (45), 12659-12666.
- [6] Rodriguez-Rodriguez, C.; Telpoukhovskaia, M.; Alí-Torres, J.; Rodríguez-Santiago, L.; Manso, Y.; Bailey, G-A.; Hidalgo, J.; Sodupe M.; and Chris Orvig. Metallomics, 2015, 7 (1), 78-87.