

Modelado computacional de las interacciones entre moléculas huésped y sus receptores



Rubicelia Vargas* y Jorge Garza*

Departamento de Química
División de Ciencias Básicas e Ingeniería
Universidad Autónoma Metropolitana Iztapalapa

*rvargas@izt.uam.mx *jgarza@izt.uam.mx

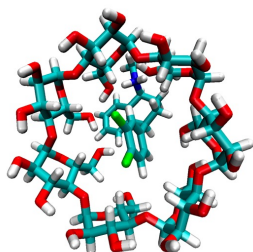


Objetivo

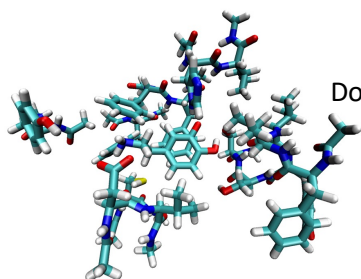
Encontrar las interacciones intermoleculares relevantes en la estabilidad de sistemas huésped-hospedante a través de técnicas de la química teórica y computacional

Sistemas huésped-hospedante

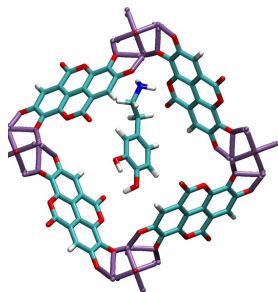
β -ciclodextrina-sertralina



Dopamina-neurotransmisor



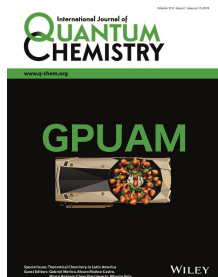
Dopamina-MOF



En esta línea de investigación se utilizan técnicas y herramientas de la química teórica y computacional para dilucidar cómo interaccionan las moléculas entre sí, ejemplos:

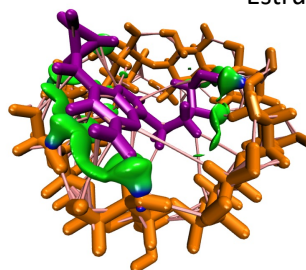
- Fármaco-blanco terapéutico.
- Neurotransmisor-receptor.
- Fármaco-vehículo.

Herramientas computacionales



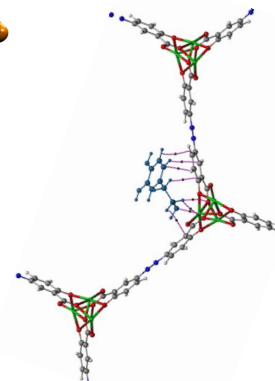
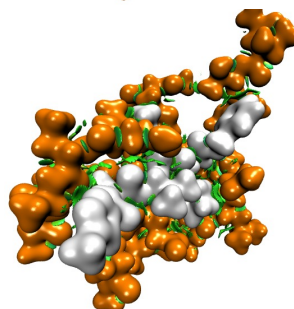
Predicción a partir de la química cuántica

Estructuras de mínima energía



Trayectorias de enlace

Regiones de interacción atractivas entre huésped y hospedante



Se determinan las geometrías moleculares termodinámicamente más estables, la energía con que se unen los complejos y esclarecer el tipo interacción química entre las sustancias. Las interacciones químicas no covalentes entre moléculas, como los puentes de hidrógeno, son relevantes porque dan estabilidad a los sistemas y pueden ser utilizadas para dar pistas en el diseño de materiales en general.

Aplicaciones abordadas por nuestro grupo de trabajo:

- Estudio de antipsicóticos y su interacción con el receptor de dopamina y serotonina [Physical Chemistry Chemical Physics. **23**, 14224-14230 (2021)].
- Estructuras metal orgánicas como acarreadores de fármacos [ChemComm (2023) en prensa].
- Interacción de un inhibidor y la proteasa principal de SARS-CoV-2 [Computational and Structural Biotechnology Journal. **19**, 4669-4675 (2021)].

La UAM Iztapalapa cuenta con el Laboratorio de Supercómputo y Visualización en Paralelo.

