

Métodos multi escala QM-MM aplicados al estudio de la reactividad de tioles y selenoles frente a peróxido de hidrógeno

Dr. Darío Estrín

DQIAQF/INQUIMAE, Facultad de Ciencias Exactas y Naturales, UBA

- **Lunes 6 de octubre a las 13 hs.**
- **Aula: RFP 3er piso DQIAQF/INQUIMAE**

Resumen

La vida en la Tierra evolucionó en presencia de peróxido de hidrógeno, y otros peróxidos que surgieron con el advenimiento del metabolismo aeróbico. Estos peróxidos durante muchos años, se consideraron sólo subproductos tóxicos. Actualmente también se consideran productos metabólicos que desempeñan funciones celulares fisiológicas esenciales, además de desempeñar un papel clave en muchos procesos biotecnológicos. Los organismos han desarrollado mecanismos eficientes para detoxificar peróxidos, basados en dos tipos de química redox: las catalasas/peroxidasas, que dependen de un grupo prostético hemo para la reducción del peróxido, y las peroxidasas basadas en tioles, que basan sus actividades redox en residuos especializados de cisteína o selenocisteína (Cys/Sec) muy reactivos.

En este seminario, presentaré un enfoque de simulación computacional multiescala, en el que se emplean simulaciones clásicas y cuántico-clásicas (QM-MM) a nivel de la teoría del funcional de la densidad (DFT) para explorar las bases moleculares de la reactividad química de grupos tioles frente a peróxidos, en estrecha sinergia con mediciones cinéticas experimentales.

Específicamente, mostraré resultados relativos a:

- 1) La reactividad diferencial de tioles de bajo peso molecular con peróxido de hidrógeno y peroxinitrito.
- 2) El caso paradigmático de la peroxirredoxina de *Mycobacterium Tuberculosis*, denominada AhPE frente al peróxido de hidrógeno y los peróxidos de ácidos grasos.
- 3) Un análisis de la reactividad de persulfuros y seleniuros de bajo peso molecular, en comparación con los análogos de tioles, para esclarecer la posible función de estas sustituciones naturales de S por Se.