



Búsqueda y caracterización de enlace químico en pares de bases del ADN

Alejandra Bernal Gudiño¹ y Juan Erick Cerpa Calixto¹

¹ Unidad Profesional Interdisciplinaria de Ingeniería Campus Guanajuato del IPN. ale.bg1296@gmail.com

Una de las características fundamentales del ADN es su estructura en doble hélice y con un apareamiento de bases prácticamente perfecto A·T y C·G (reglas de Chargaff). La cuestión es, si lo anterior está condicionado por otros factores de la estructura de los ácidos nucleicos, o es algo que tiene tendencia a producirse y depende sólo de las bases.

Los estudios cristalográficos han puesto de manifiesto que las bases pueden auto asociarse para formar complejos mediante la formación de puentes de hidrógeno^a. Bajo esta hipótesis, comenzó el interés en el estudio del acoplamiento de bases.

En el presente trabajo se aborda el estudio de la interacción de los enlaces de hidrógeno entre los complejos, 8-oxoguanina, 6-tioguanina, y enlaces entre las bases U-U1, G-G, C-C y complejo G-C-WC C-C, utilizando el descriptor de interacciones no covalentes (NCI, por sus siglas en inglés) desarrollado en 2010 por Contreras-García y colaboradores^b. Para su visualización, se empleó VMD (Visual Molecular Dynamics), con la intención de comprender la interacción de los pares de bases.

a) Lai, J. S.; Kool, E. T. Selective Pairing of Polyfluorinated DNA Bases *J. Am. Chem. Soc.* **2004**, *126*, 3040–3041.

b) E. R. Johnson, P. Mori-Sánchez, S. Keinan, A. J. Cohen, J. Contreras-García, W. Yang, *J. Am. Chem. Soc.* **2010**, *132*, 6498