

## ESTUDIO DE LA OCURRENCIA DE PÉPTIDOS BIOACTIVOS EN PROTEÍNAS DE SECUENCIA CONOCIDA MEDIANTE MÉTODOS BIOINFORMÁTICOS

Nardo Agustina

Añón Maria Cristina (Dir.), Parisi Gustavo (Codir.)

Centro de Investigación y Desarrollo en Criotecnología de Alimentos (CIDCA), Facultad de Ciencias Exactas, UNLP –CONICET-CIC.

[aenardo@biol.unlp.edu.ar](mailto:aenardo@biol.unlp.edu.ar)

**PALABRAS CLAVE:** Peptidos Bioactivos, Búsqueda Secuencial, Asignación de estructura.

Los péptidos bioactivos (PB) son secuencias cortas (3-20 residuos) que se encuentran encriptados en proteínas alimentarias y son capaces, al ser ingeridos, de modular la actividad biológica de diferentes enzimas humanas desempeñando papeles clave en diferentes metabolismos tales como la regulación de la presión sanguínea, estimulando o suprimiendo la acción del sistema inmunológico, modulando la actividad del sistema nervioso entre otros. Si bien es aceptado que cualquier proteína puede ser fuente de péptidos bioactivos, aun no se ha indagado en las características globales de las proteínas que los contienen y si es que existe alguna relación estructural y secuencial entre las mismas. Se seleccionaron de la base de datos BIOPEP 1.679 péptidos con longitudes mayores a 5 residuos para realizar la búsqueda de ocurrencias exactas en proteínas de secuencia conocida utilizando la base de datos no redundante de NCBI. De esta forma se identificaron 88.909 secuencias con longitudes que abarcan desde 6 a 13.256 residuos que presentaron de 1 a 65 ocurrencias exactas de al menos un PB en su secuencia. Con el objeto de caracterizar las secuencias que contienen al menos un péptido y estudiar si existe correlación entre la estructura, tipo de plegamiento o superfamilia estructural y la ocurrencia y actividad del PB se realizó la asignación de dominios estructurales mediante búsquedas de similitud secuencial con el algoritmo BLAST contra la base de datos de dominios estructurales de CATH. Se asignó estructura a 58.167 secuencias (72,2 % de la cantidad inicial). Las secuencias a las cuales fue posible asignar estructura se agruparon en 333 superfamilias de dominios según CATH de las cuales solo cuatro plegamientos agrupan el 87,54 % de las secuencias.



Se estudió la distribución de los distintos tipos de PBs por superfamilia estructural, encontrándose que, las distintas superfamilias pueden tener varios PBs iguales o con distintas propiedades biológicas. El total de superfamilias fue dividido en dos, considerando arbitrariamente el número de 5 ocurrencias de PBs como límite. Con el objetivo de indagar si las proteínas con más de 5 PBs tienen alguna particularidad funcional, se analizó las distribuciones del número de términos GO (Gene Ontology) asociados a cada superfamilia, que describen la función molecular, el proceso biológico en donde participa la proteína y el componente celular al que pertenece. Encontramos que las superfamilias con más de 5 PBs son secuencialmente y estructuralmente más diversas que el grupo con menor número de PB y, además, son secuencialmente y estructuralmente más diversas que todas las superfamilias de CATH tengan o no PBs. Estos resultados son promisorios para desarrollar herramientas bioinformáticas para identificar nuevas posibles proteínas conteniendo PBs basándose en características globales de la proteína y no en el conocimiento previo de PBs ya caracterizados y depositados en bases de datos.

## TRANSESTERIFICACIÓN CATALÍTICA DE ACEITE DE RICINO CON BUTANOL

Navas Marisa Belén

Mónica Laura Casella (Dir.)

Centro de Investigación y Desarrollo en Ciencias Aplicadas (CINDECA), Facultad de Ciencias Exactas, UNLP –CONICET-CIC.

[marisanavas@quimica.unlp.edu.ar](mailto:marisanavas@quimica.unlp.edu.ar)

**PALABRAS CLAVE:** Biodiesel, Catálisis, Catalizadores Heterogéneos.

Con el fin de estudiar la reacción de transesterificación de aceite de ricino con butanol, se prepararon catalizadores de MgO y ZnO soportados en  $\gamma$ -Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>, y mezclas de ambos óxidos en proporciones 0.25, 0.5, 1 y 5 Zn/Mg. Los mismos fueron caracterizados empleando difracción de rayos X, fisión de N<sub>2</sub> y microscopía de barrido electrónico. Los resultados

fueron acordes en todos los casos a sólidos mesoporosos con alta superficie específica, exhibiendo la fase cristalina óxido. Se obtuvieron en todos los casos conversiones



de triglicéridos mayores al 85% y selectividades de prácticamente 100% hacia FABE (ésteres butílicos de ácidos grasos). Los buenos resultados puede atribuirse a las propiedades básicas del MgO, y simultáneamente las propiedades anfotéricas del ZnO, que permiten que tanto los

triglicéridos como los ácidos grasos libres del aceite sean convertidos en ésteres.

## HIDROTALCITAS EN LA SÍNTESIS MULTICOMPONENTE DE COMPUESTOS 4H-PIRANOS

Nope Eliana

Romanelli Gustavo (Dir.), Sathicq Gabriel (Codir.)

Centro de Investigación y Desarrollo en Ciencias Aplicadas (CINDECA), Facultad de Ciencias Exactas, UNLP –CONICET-CIC.

[eliana.nope@quimica.unlp.edu.ar](mailto:eliana.nope@quimica.unlp.edu.ar)

**PALABRAS CLAVE:** Hidrotalcita, Pirano, Reacción multicomponente.

Las hidrotalcitas (hidroxicarbonatos de magnesio y aluminio) son minerales que pertenecen a la familia de las arcillas aniónicas, estos materiales de fórmula general  $[M_2^{+1-x}M_3^{+x}(OH)_2]^{x+}(An^-)_x/m \cdot nH_2O$ , desempeñan un papel importante en varias reacciones catalizadas por materiales de carácter básico como condensaciones de Claisen-Schmidt y de Knoevenagel, estos materiales actúan como catalizadores heterogéneos y son altamente activos y selectivos. En este trabajo se estudia hidrotalcitas de Mg/Al ( $Me^{2+}/Me^{3+}=3$ ;  $Me^{2+} = Ni$  o  $Co$ ) en la síntesis multicomponente de compuestos 4H-piranos. Estos materiales se sintetizan usando una mezcla de urea,  $Mg(NO_2)_3$  y  $Al(NO_3)_3$  con una relación  $Me^{2+}/Me^{3+}=3$  y una solución alcalina de NaOH y  $Na_2CO_3$  2M. La caracterización de estos materiales se realiza por medio de diversas técnicas analíticas. Los resultados obtenidos del análisis de difracción de rayos X muestran señales características de minerales arcillosos con estructuras en capas y con excelente cristalinidad, en el análisis de temperatura programada de desorción de  $CO_2$  se observa la presencia de

sitios básicos de carácter fuerte y los análisis de FTIR presentan bandas que se relacionan con los grupos carbonatos característicos de estos materiales. La evaluación de la actividad catalítica de estos materiales se estudió en la síntesis multicomponente de 4H-piranos. La reacción entre malononitrilo (1 mmol), benzaldehído (1 mmol) y acetoacetato de etilo (1 mmol) se tomó como reacción modelo para optimizar las condiciones de reacción y se encontró que la reacción se favorece en condiciones libres de solvente a temperatura ambiente durante 8 horas de reacción y se obtienen mayores rendimientos hacia el pirano con la hidrotalcita de Níquel, esto podría estar relacionado con la distribución de los sitios activos de este catalizador, dado que este material presenta un mayor área superficial con respecto a las hidrotalcitas de Magnesio y Cobalto. En conclusión se describe un catalizador heterogéneo eficiente de NiMgAl(OH) para la síntesis multicomponente de compuestos 4H-pirano, las ventajas incluyen preparación simple del catalizador, condiciones de reacción suaves, fácil recuperación y reutilización del catalizador.

## SÍNTESIS, ESTUDIOS ESPECTROSCÓPICOS, ESTRUCTURALES Y CONFORMACIONALES DE SELENO/TIOUREAS

Nossa González Diana Lisseth

Erben Mauricio Federico (Dir.), Gómez Cataño Jovanny Ariass (Codir.)

Centro de Química Inorgánica (CEQUINOR), Facultad de Ciencias Exactas, UNLP-CIC-CONICET.

[diananossa@quimica.unlp.edu.ar](mailto:diananossa@quimica.unlp.edu.ar)

**PALABRAS CLAVE:** Tiourea, Selenourea, Guanidinas, DRX- monocristal.

Las tio/selenoureas son compuestos que contienen en su estructura la funcionalidad  $>N-C(=X)-N<$ , donde  $X=S$  y  $Se$ . Sus propiedades espectroscópicas, conformacionales y estructurales son estudiadas mediante el análisis las medidas de FTIR, RAMAN, RMN, DRX de monocristal y cálculos mecano-cuánticos.

Entre los atractivos que presenta este tipo de compuestos, se encuentra la posibilidad de que presenten actividad biológica, también pueden utilizarse como bloques de construcción para mejorar o potencializar propiedades específicas de materiales [1, 2]. Además, la síntesis de los complejos metálicos con tio/selenoureas es de gran interés porque estos compuestos son considerados precursores promisorios para materiales semiconductores, obtención de films y nanopartículas de sulfuros y

seleniuros con diferentes metales como Cd [3] y Pb [4, 5]. Síntesis de tio/selenoureas:

Las tio/selenoureas son obtenidas mediante la reacción de un cloruro de ácido con KSCN/KSeCN según sea el caso, seguido de la adición de la amina correspondiente, tal como se muestra en el Esquema 1 Hemos seleccionado como grupo R1 a los restos 1-adamantano y 3-noradamantano y diferentes aminas con restos aromáticos y alifáticos. Con esta metodología hemos sintetizado, aislado y purificado un conjunto de ocho (8) tioureas y un diseleniuro nuevos. A todos los compuestos se les ha realizado caracterización fisicoquímica y espectroscópica completa que incluye la medida de los espectros vibracionales de infrarrojo y Raman y de Resonancia Magnética Nuclear de  $^1H$ ,  $^{13}C$ ,  $^{19}F$ . Fue posible, además, obtener monocristales para casi la