



XVIII CONGRESO COLOMBIANO DE QUÍMICA

Sostenibilidad e Innovación: Compromiso de Paz

Popayán, 6-8 de noviembre de 2019

UAN
UNIVERSIDAD
ANTONIO NARIÑO

EFEECTO DE RESORCINARENOS SULFONADOS EN LA ACTIVIDAD DE LA LIPASA DE PANCREAS PORCINO

**Obradith Caicedo, Andrés Malagón,
Luisa Velásquez**

Grupo de investigación Ciencia e Ingeniería de materiales
(Bogotá, Colombia)



Asociación
Química
Colombiana



Contenido

1. Introducción
2. Metodología/Parte Experimental
3. Resultados y Análisis/Discusión
4. Conclusión
5. Agradecimientos
6. Bibliografía

Introducción

Mecanismo de activación interfacial

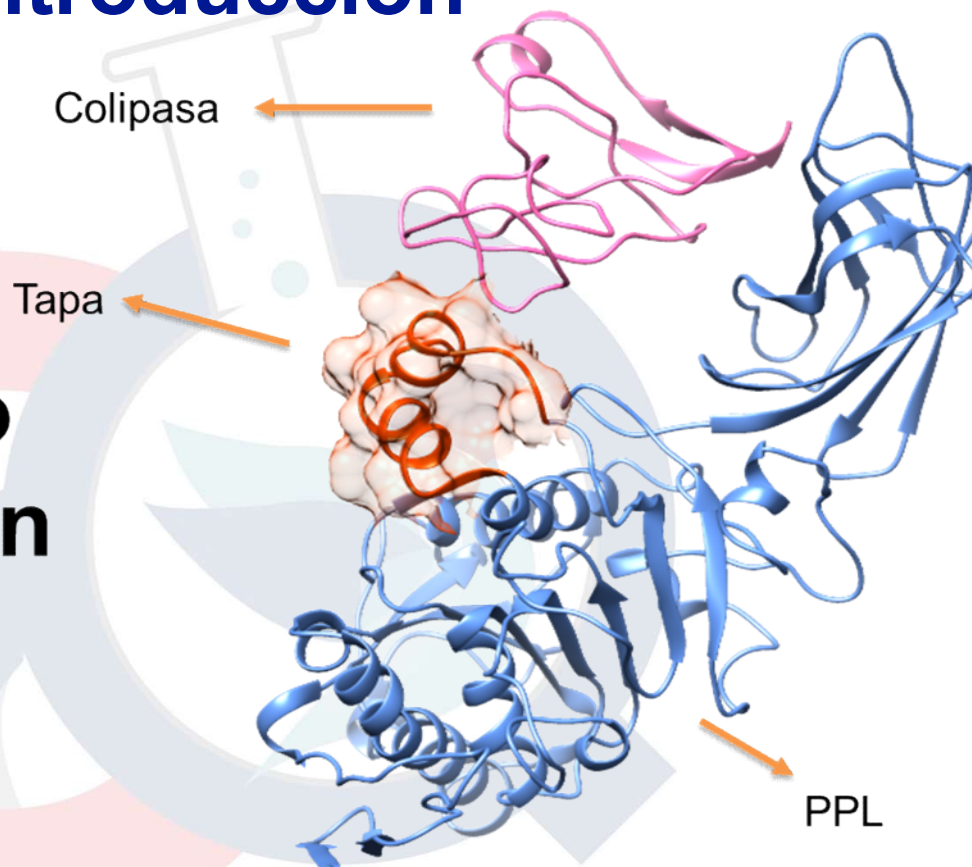


Fig 2. Superficie molecular de PPL
Adaptada por: Luisa Velasquez

2. Manoel, E., dos Santos, J., Freire, D., Rueda, N., & Fernandez-Lafuente, R. (2015). Enzyme And Microbial Technology.

Resorcinarenos

Macrociclos que adquieren una característica de anfitrión-huésped por medio de interacciones como: puentes de hidrogeno, dipolo-dipolo, catión- π , π - π e hidrofóbicas

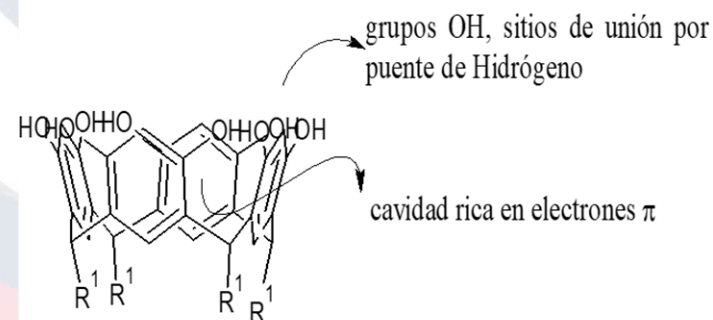
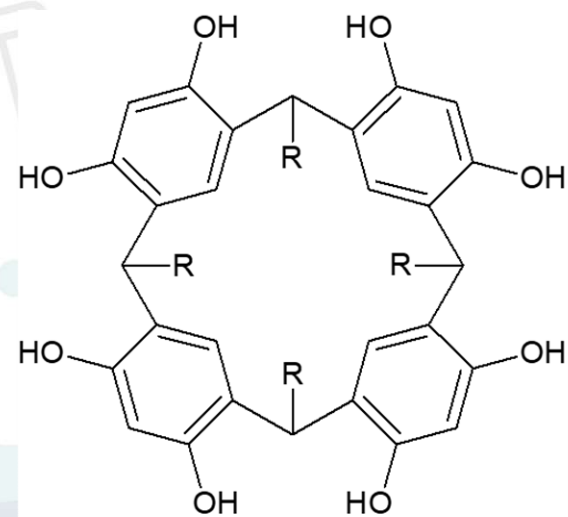


Fig 5. Estructura general de los resorcinarenos

5. Mandolini, L., & Ungaro, R. (2000). *Calixarenes in action*. London: Imperial College Press. pp.15-68

Metodología

1) Determinación de la actividad de la lipasa

✓ Espectrofotometría UV-Vis a 405nm

Realizado en
espectrofotometro Agilent
Cary 60, con Peltier para
control de temperatura

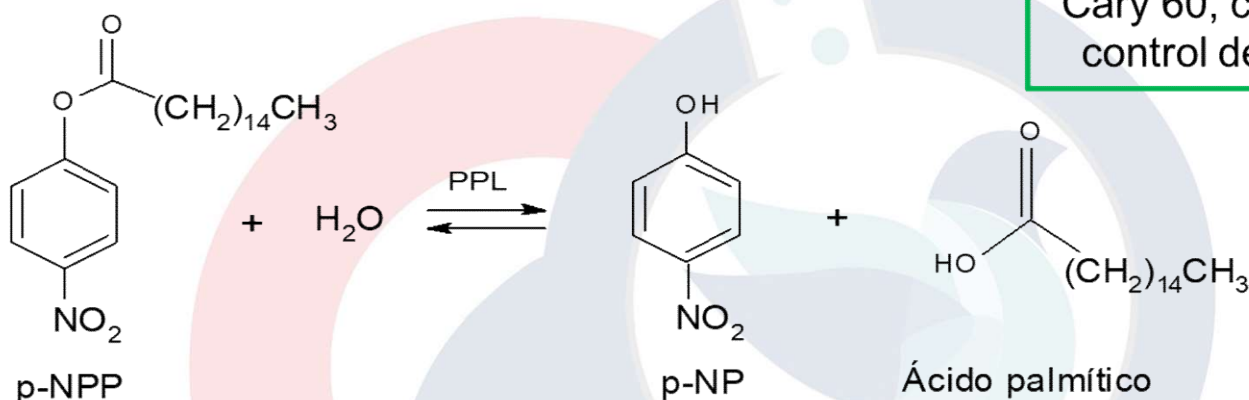
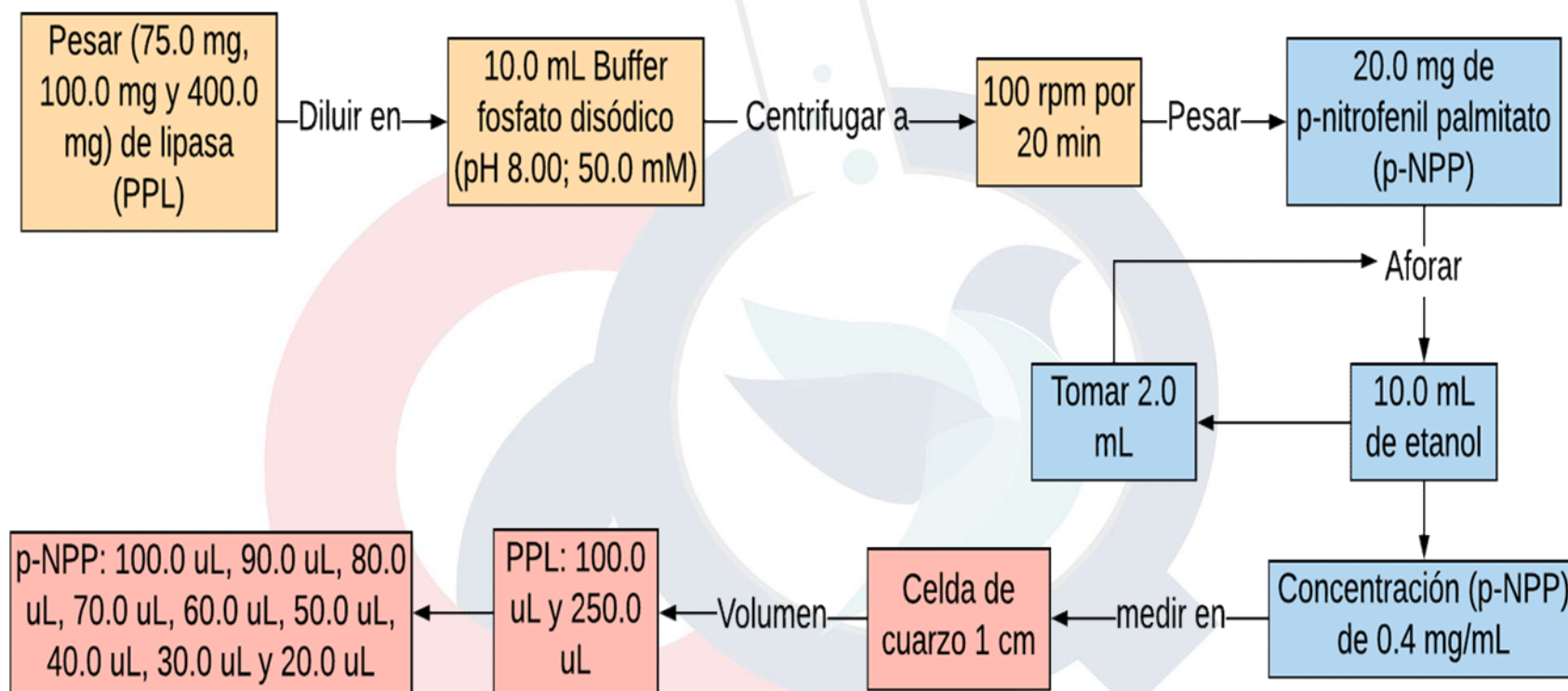


Fig 8. Reacción de la Lipasa pancreática con p-nitrofenil palmitato (p-NPP)

Se realizo una prueba de calibración para el p-NP

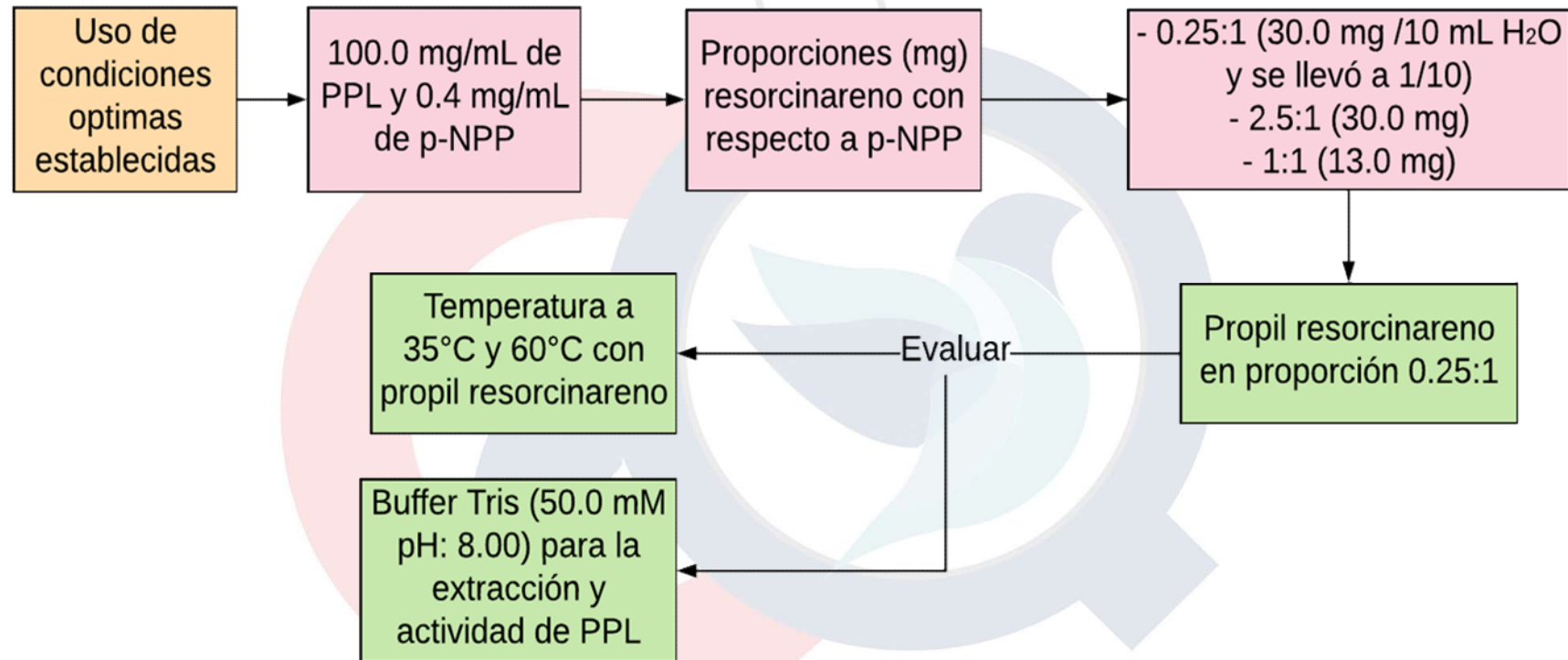
6. Bank, R. (n.d.). *RCSB PDB - 1AKN: STRUCTURE OF BILE-SALT ACTIVATED LIPASE*. [online] recuperado de: <https://www.rcsb.org/3d-view/1AKN/1>
7. Guo, J., Chen, C., Wang, S., & Huang, X. (2015). *Enzyme And Microbial Technology*.

Condiciones actividad optima PPL



7. Hernández-García, S., García-García, M., & García-Carmona, F. (2017). *Analytical Biochemistry*.

Interacción Resorcinareno - PPL



13



2) Docking molecular

Las geometrías
iniciales de los
cinco
resorcinarenos
fueron
modeladas en el
software
Avogadro 1.2.0

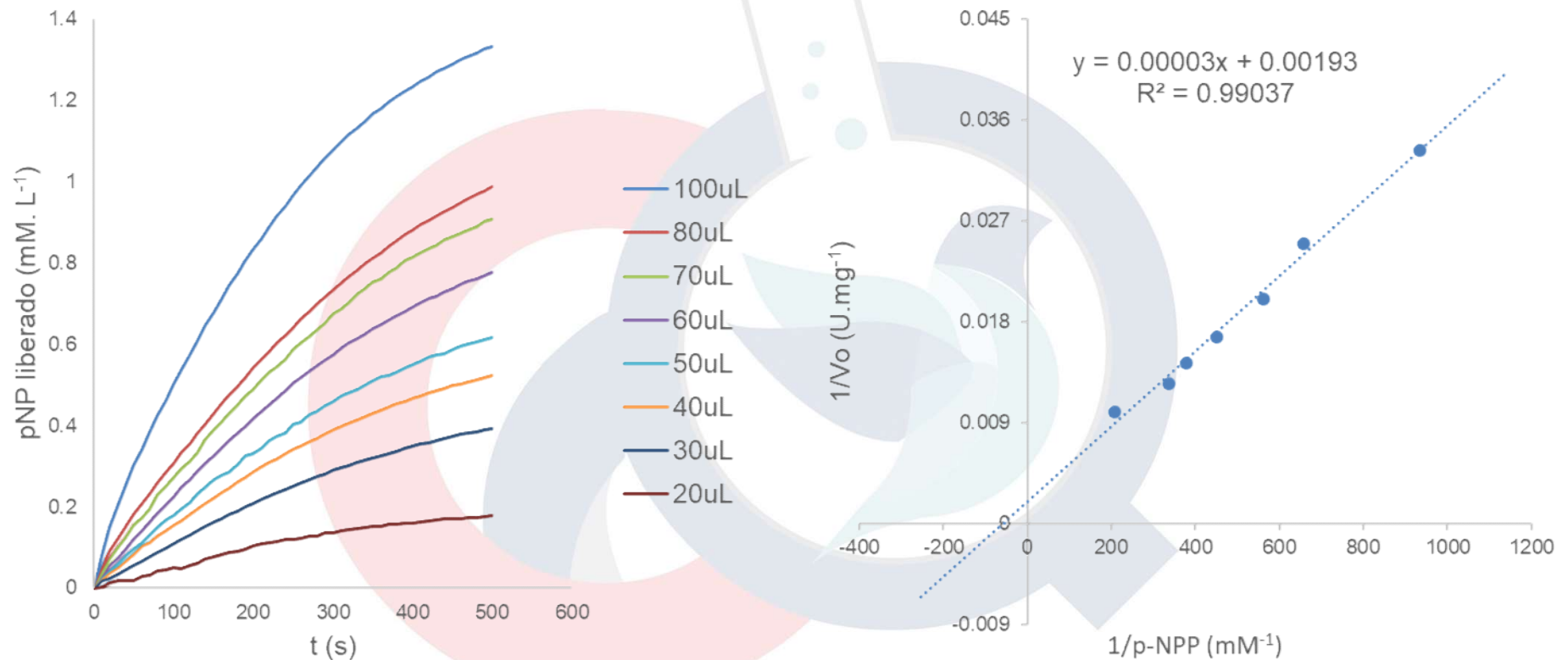
La estructura
de PPL se
descargó de
Protein Data
Bank, se
usaron las
cadenas A y B

Los resultados
fueron
evaluados por
medio del
sistema de
docking ciego
en SwissDock

Los clusters se
procesaron
empleando el
software USCF
Chimera
1.13.1rc

Resultados

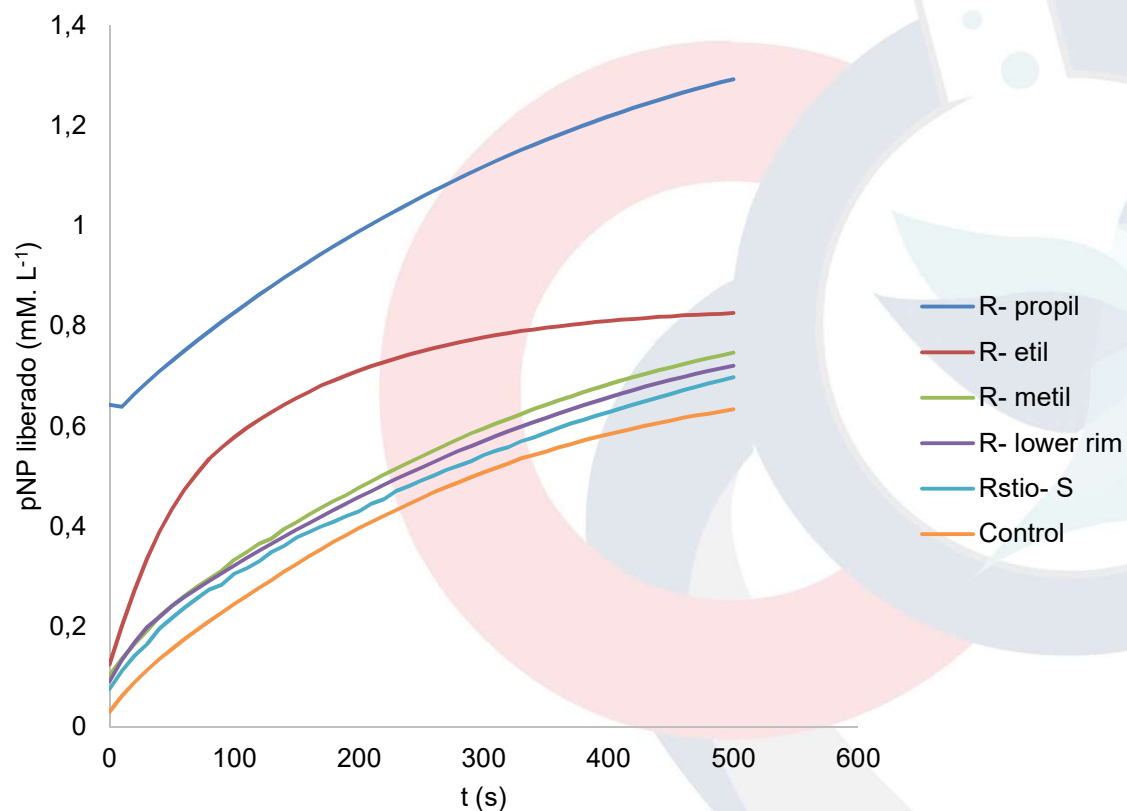
a) Condiciones actividad optima PPL



Km 0,0161mM
y Vmax 5,184
U. mg⁻¹



b) Interacción resorcinareno - PPL



Proporción 0,25 : 1 (p-NPP)

Comparación en 200 s

-R-azufrado = 106,1%

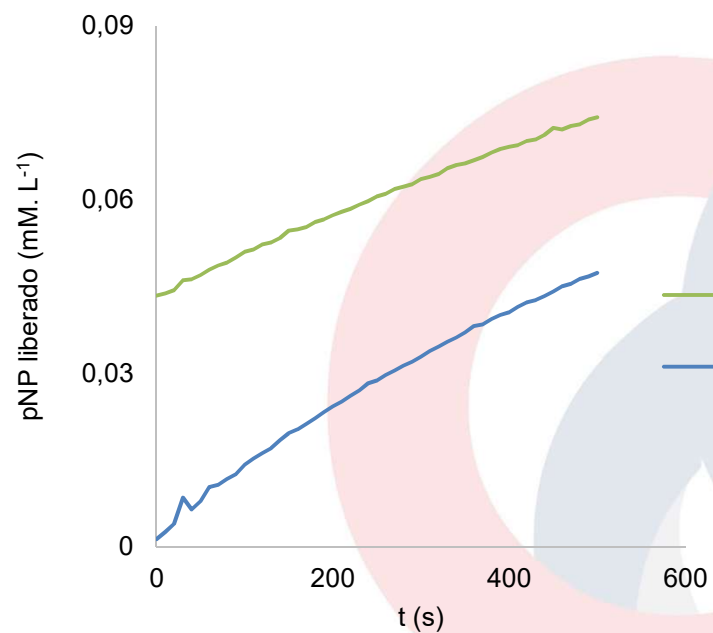
-Lower rim = 115,7%

-Metil = 119,0%

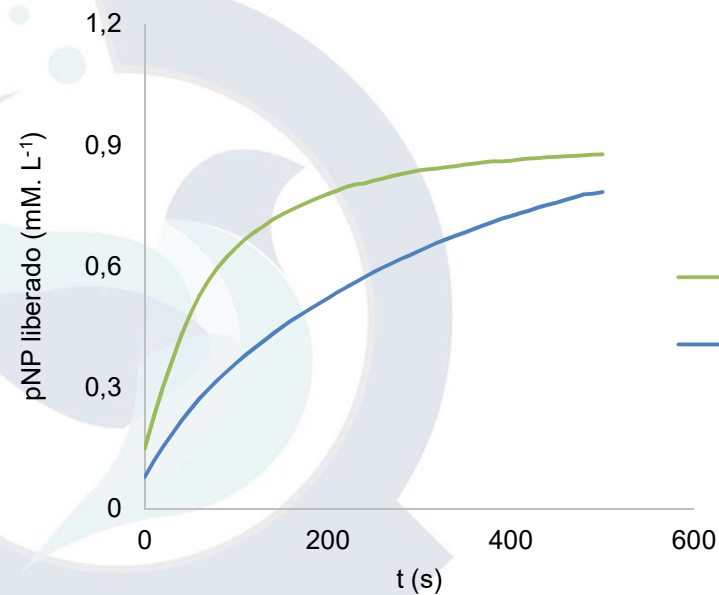
-Etil = 175,7%

-Propil = 240,3%

c) Ensayos a diferentes temperaturas



60 °C



35 °C

d) Ensayo con buffer Tris

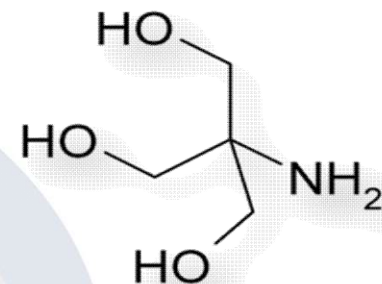
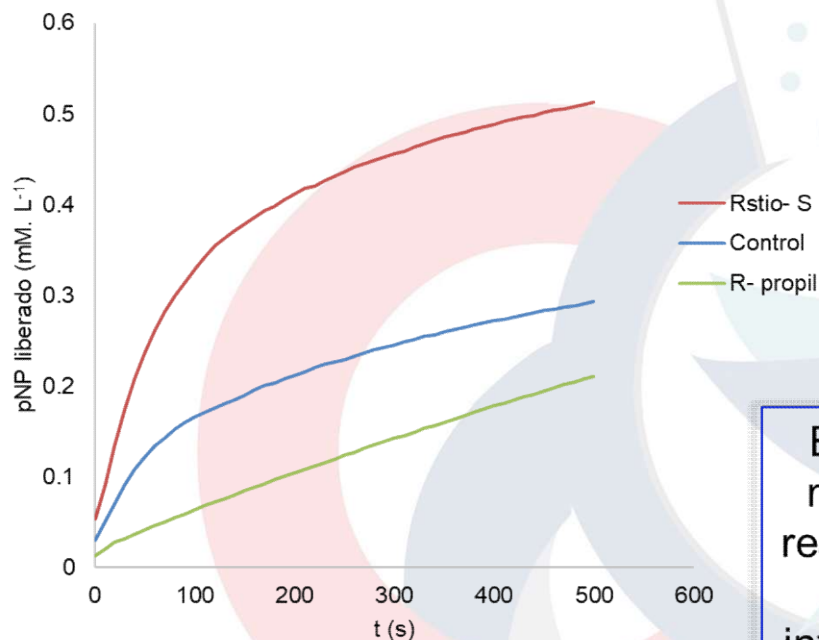
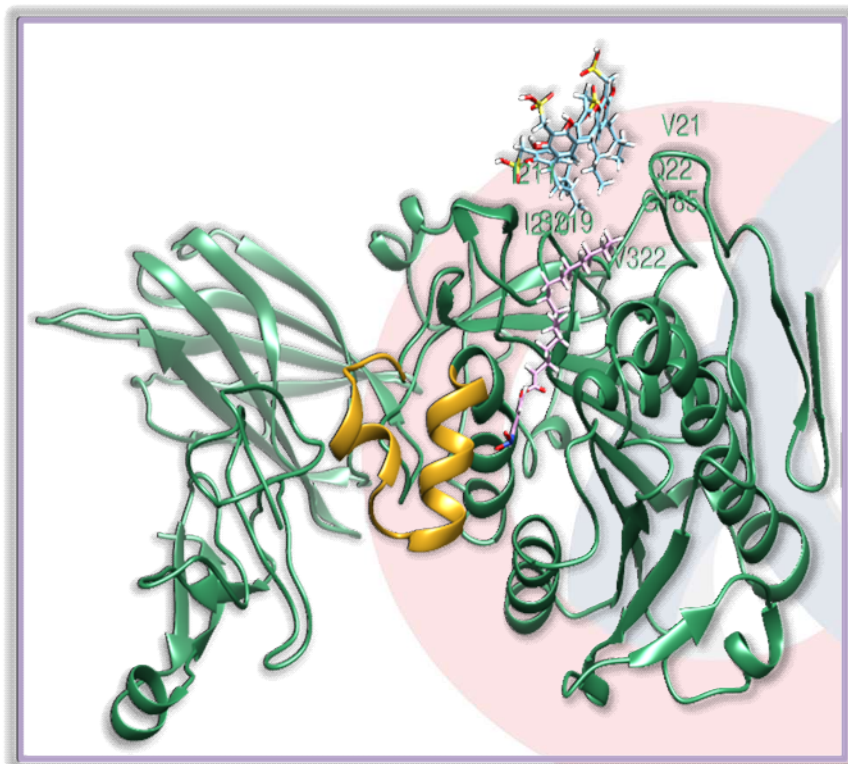


Fig 9. Estructura química tris(hidroximetil)aminometano

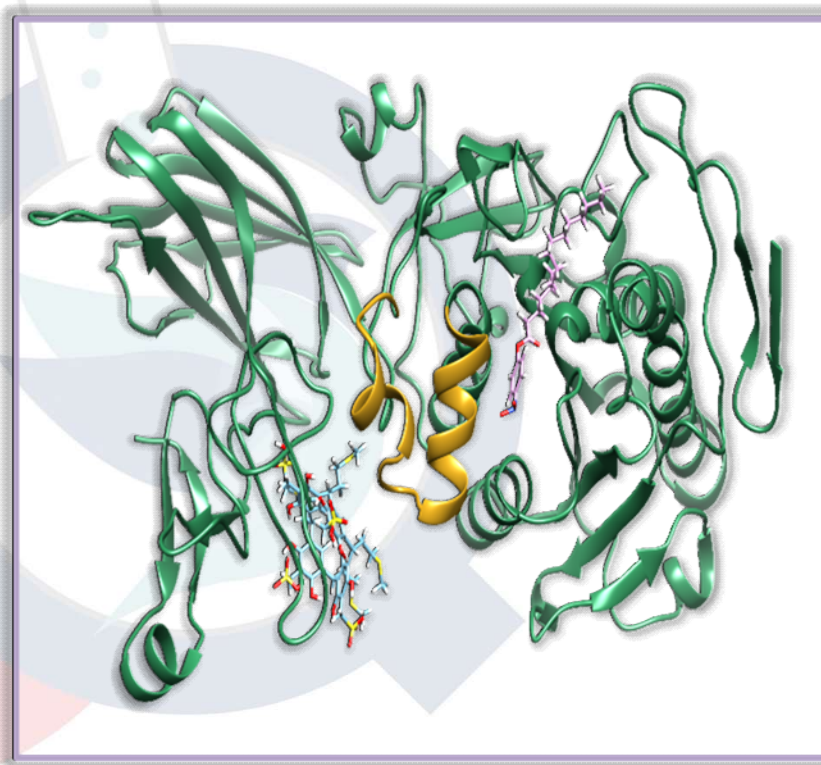
El buffer Tris permite extraer la enzima y mantener su actividad, pero al evaluar la reacción enzimática con los resorcinarenos se genera una interferencia por su interacción con el grupo amino presente en la estructura del Tris, generando un complejo estable

9. Ryzhkina, I., Pashirova, T., Habicher, W., Kudryavtseva, L., & Konovalov, A. (2004). *Macromolecular Symposia*, 210(1), 41-48.

e) Docking molecular



R- propil



Rstio- S

Conclusiones

1) Se determinaron los valores óptimos de actividad catalítica para la reacción enzimática de la lipasa con su respectivo sustrato

2) Se evaluó la interacción de cinco resorcinarenos en la reacción catalítica de PPL, en donde se observó una influencia de tipo tensoactivo que permite un aumento en la velocidad de reacción, principalmente por R-propil.

3) Se realizó docking molecular y se observó que R- propil interactúa con aminoácidos como valina y glutamina facilitando la entrada del sustrato al sitio activo de la enzima.

Agradecimientos

Los autores agradecen a la U. de los Andes, departamento de Química y al Dr. Edgar F. Vargas, por facilitar algunos equipos para la parte experimental.



¡¡ GRACIAS !!

Obradith Caicedo

obradithcaicedo@usantotomas.edu.co