



## **CARACTERIZACIÓN DE LA INTERACCIÓN ENTRE CLUSTER DE Au Y AMINOÁCIDOS AZUFRADOS**

**WALDO ANDRÉS ACEVEDO CASTILLO  
INGENIERO EN BIOINFORMÁTICA**

### **RESUMEN**

En el ámbito biológico es posible caracterizar ciertas reacciones inmunológicas a través de interacciones que involucran estructuras de átomos de oro y proteínas tales como opsoninas (proteína de suero sanguíneo que se une a microbios para facilitar su fagocitosis en macrófagos), Factor de Necrosis Tumoral en terapia de Aurimune, fibronectina, etc. Este trabajo fue articulado tal como sigue: 1) Se obtuvieron distintas representaciones de cúmulos de Au a partir de la remoción de átomos desde la celda unitaria fcc con el fin de simular un cluster 2) Realizar una optimización de la geometría de los compuestos orgánicos seleccionado. 3) A partir de los resultados anteriores, construir sistemas en interacción entre los compuestos orgánicos y los cúmulos de átomos seleccionados. 4) Realizar un estudio en términos energéticos del punto anterior, mirando el sistema como la construcción de una súper molécula e interacción de “distancias infinitas”.

Los cálculos teóricos fueron realizados sobre superficie de cluster de Au en interacción con compuestos tiólicos, las cuales fueron ejecutados con el código Gaussian03. En todos los casos, los compuestos orgánicos fueron completamente optimizados, mientras que las estructuras metálicas fueron construidas a partir de la celda unitaria fcc (cubo centrada en sus caras) y su geometría fue congelada cuyas coordenadas cartesianas se mantuvieron fijas. La química computacional se realizó con el método híbrido B3LYP y las bases utilizadas para describir los átomos que componen los sistemas en estudio fueron la base pseudopotencial LANL2DZ para los átomos metálicos, y los compuestos orgánicos se estudiaron con el conjunto de bases 6-31g (d, p) para el átomo de azufre y el resto con conjunto de bases 3-21g.

Los defectos de la estructura de oro fueron modelados como concepto de cluster. La visualización de los resultados fueron hechos con los códigos de Gaussview y VMD.

De los estudios teóricos muestran que la interacción entre cluster de Au y compuestos orgánicos en estado desprotonado es energéticamente más estable que en estado protonado.

Por otro lado, a medida que aumenta el número de defectos del cluster en interacción con compuesto orgánico, más estable es el conformero, por lo tanto, sugiere que la interacción del cluster de oro real con los aminoácidos de las proteínas es mediada por los defectos del cluster. En el caso de la metionina, cuya característica estructural es la ausencia del grupo sulfhidrilo, lo que permite inferir que la interacción con la superficie metálica está mediada por la densidad electrónica del azufre.

Palabras Claves: Cluster de Au, cisteína, metionina, interacción.

## ABSTRACT

In the biological field it is possible to characterize some immunological responses through interactions involving gold atoms structures and proteins such as opsonins (serum protein that binds to microbes to facilitate their phagocytosis in macrophages), Tumour necrosis factor therapy of Aurimune, fibronectin, and so on. The aim of this work is to try to suggest a theoretical model of the main interaction of biological compound containing sulphur with gold cluster defects. This work was articulated as follows: 1) There were various representations of clusters of Au from the removal of atoms from the unit cell fcc in order to simulate a cluster 2) Geometry optimization study of selected organic compounds. 3) From the previous results, to build systems in interaction between organic compounds and clusters of atoms selected. 4) Realize a study in energy terms from the previous point, looking at the system as the construction of a super-molecule and interaction of "infinite distances".

Theoretical calculations were made on the surface of Au cluster in interacting with thiol compounds, which were performed with the Gaussian03 code. In all cases, the organic compounds were completely optimized, whereas the metallic structures were built from the unit cell fcc (faces centered cube) and its geometry was frozen whose cartesian coordinates were kept fixed. Computational chemistry was performed using the hybrid method B3LYP and the basis used to describe the atoms that make up the systems in study were the basis pseudopotential LANL2DZ for metal atoms and organic compounds were studied with 6-31g(d, p) basis set for the sulfur atom and the remainder 3-21g basis set. The calculations were done on "Neolith" computer cluster of National Supercomputer Center on Sweden. The gold defect structures were modeled as cluster concepts. The visualization of the results was done with Gaussview and VMD codes.

The theoretical studies showed the interaction of organic compounds with its unprotonated state on Au cluster were energetically more stable than its protonated state. Moreover, with increasing the number of defects on the system more stable conformer. Those results suggested that the amino acids contained in proteins on gold cluster interaction could be mediated by a cluster defect. In the case of methionine, its structural feature, as mean: absence of sulfhydryl group, the interaction with the metal surface was mediated by the electronic density of sulfur.



