

Anexos

Algunas definiciones de interés

Glicósido: son compuestos formados por la unión entre un azúcar simple (como la glucosa) y otra molécula mediante un enlace glicosídico

Enlace glicosídico: es un tipo de enlace covalente por el que se unen un azúcar y otra molécula, que puede ser o no un carbohidrato. Si bien el enlace más habitual incluye un átomo de oxígeno (enlace O-glucosídico) otros átomos como el de nitrógeno, azufre o carbono también ocurren de forma natural.

Glicosiltransferasas: son un conjunto de enzimas que catalizan la formación del enlace glicosídico para generar un glicósido, utilizando azúcares fosfatados (activados) como donores y grupos nucleofílicos como aceptores.

Efactor: son proteínas secretadas por bacterias patogénicas al interior de la célula a la que infectan.

Docking: método de la química computacional que tiene por finalidad predecir la conformación de una molécula y su posterior unión con otra para formar un complejo estable.

Scoring function: son funciones matemáticas usadas para predecir la afinidad de unión entre dos moléculas (enzima y sustrato) tras haberse realizado un docking.

Anexos

Tabla de los aminoácidos de acuerdo a su estructura

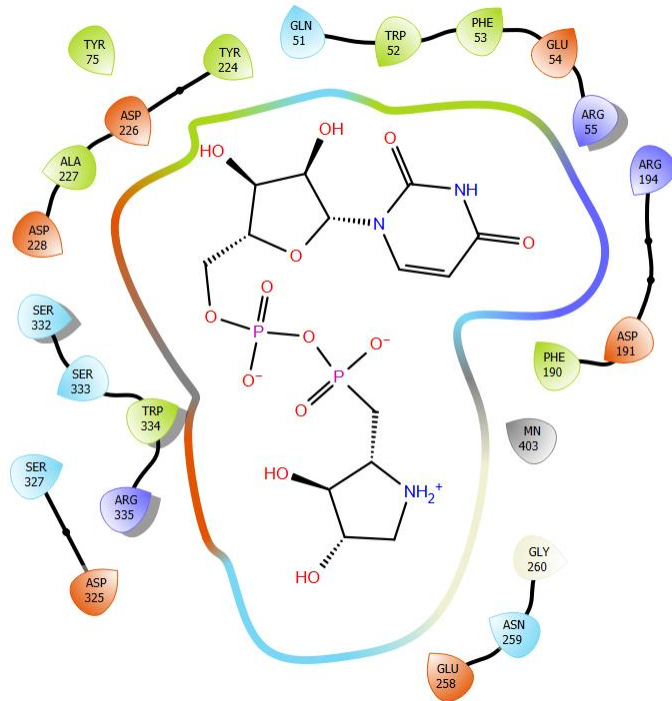
SMALL			NUCLEOPHILIC			
	Glycine (Gly, G) MW: 75.07	Alanine (Ala, A) MW: 89.09		Serine (Ser, S) MW: 105.09, pK _a ~ 16	Threonine (Thr, T) MW: 119.1, pK _a ~ 16	Cysteine (Cys, C) MW: 121.2, pK _a = 8.18
HYDROPHOBIC						
	Valine (Val, V) MW: 117.1	Leucine (Leu, L) MW: 131.2	Isoleucine (Ile, I) MW: 131.2	Methionine (Met, M) MW: 149.2	Proline (Pro, P) MW: 115.1	
AROMATIC				ACIDIC		
	Phenylalanine (Phe, F) MW: 165.2	Tyrosine (Tyr, Y) MW: 181.2, pK _a = 10.46	Tryptophan (Trp, W) MW: 204.2		Aspartic Acid (Asp, D) MW: 133.1, pK _a = 3.9	Glutamic Acid (Glu, E) MW: 147.1, pK _a = 4.07
AMIDE			BASIC			
	Asparagine (Asn, N) MW: 132.1	Glutamine (Gln, Q) MW: 146.1		Histidine (His, H) MW: 155.2, pK _a = 6.04	Lysine (Lys, K) MW: 146.2, pK _a = 10.79	Arginine (Arg, R) MW: 174.2, pK _a = 12.48

No solo la polaridad es importante a la hora de observar las interacciones ente el inhibidor y los residuos que le rodean. Otros aspectos como los puentes salinos, interacciones electrostáticas o los apilamientos- π pueden producir uniones intensas.

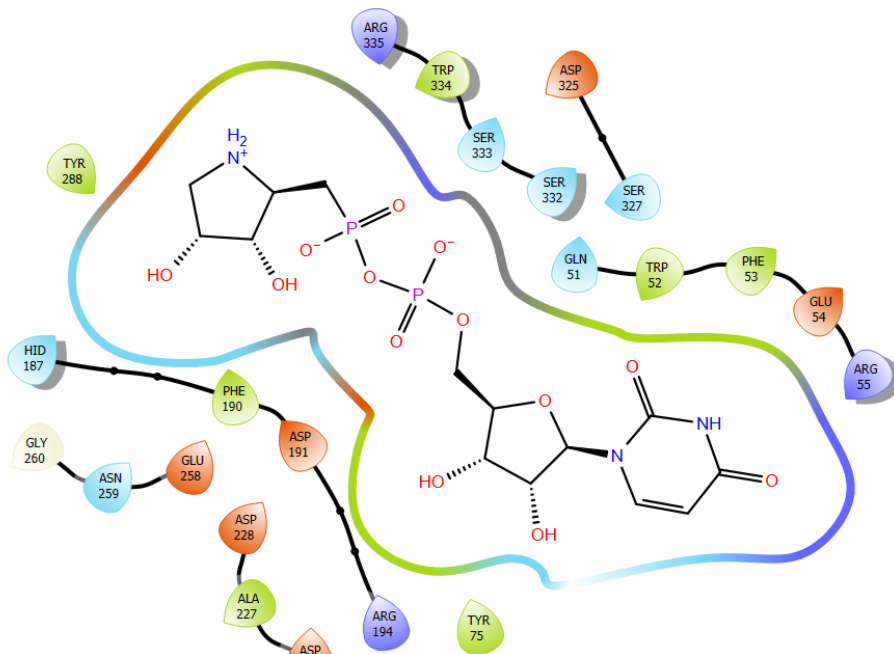
Anexos

Entorno químico de los ligandos estudiados durante el *docking*.

Ligando 2OH trans

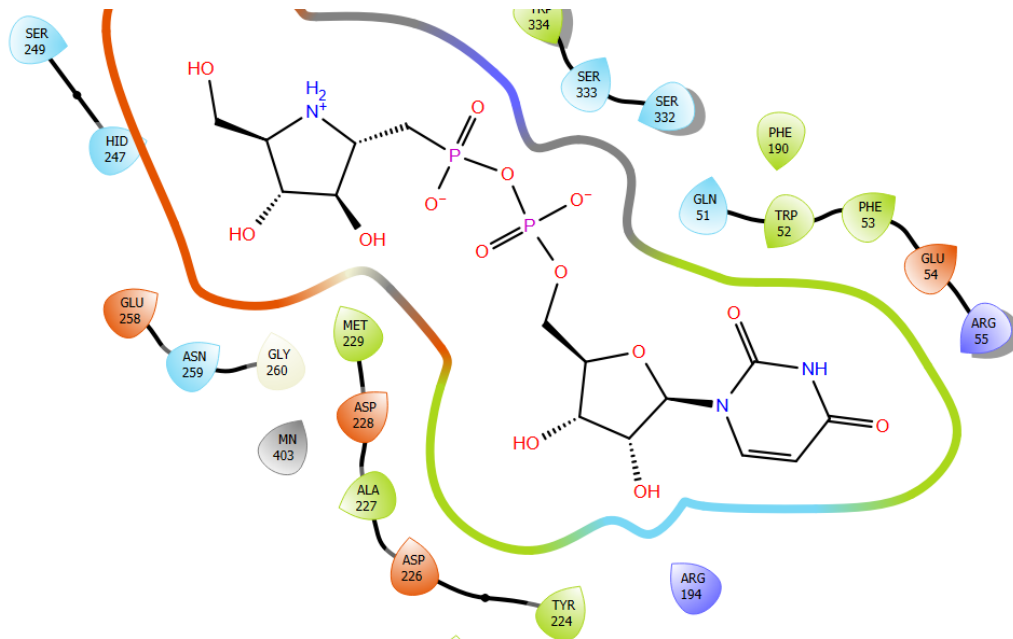


Ligando 2OH cis



Anexos

Ligando 3OH trans



Ligando CicloO

