

Identificación de factores comunes en el MEP para UBP's en las cuales se ha observado el fenómeno de replicación

viernes, 24 de octubre de 2025 18:16 (2)

El fenómeno de replicación de pares de bases no naturales o UBP's (por sus siglas en inglés) consiste en la incorporación espontánea de un trifosfato artificial en una cadena de ADN por medio de una enzima ADN polimerasa. El fenómeno fue reportado inicialmente en 1989 y, desde entonces, se han desarrollado múltiples UBP's con distinto potencial para ser replicadas.

El trabajo realizado consiste en el estudio del potencial electrostático molecular (MEP), una propiedad observable de las moléculas y calculable mediante técnicas de la química cuántica, de las distintas UBP's reportadas hasta la fecha en búsqueda de una correlación que permita predecir, en el mejor de los casos, el potencial de replicación de las moléculas.

La metodología usada para este fin consiste en el uso de TARIS, un software diseñado por nuestro grupo, que se encarga de representar el MEP como un grafo, esto es, una estructura matemática discreta bien estudiada y que posibilita la comparación del MEP según una distancia métrica. En el caso particular del estudio realizado se empleó la métrica de Zhang-Shasha o métrica de edición.

Usando la métrica de edición se calculó una matriz de distancia involucrando los grafos correspondientes a 40 UBP's identificadas en literatura. A partir de la matriz de distancias obtenida se realizó un análisis de agrupamiento en búsqueda de patrones emergentes con algún significado químico. Hasta el momento el modelo ha logrado discriminar entre UBP's hidrofóbicas e hidrofílicas además de distinguir entre UBP's heteroemparejadas y homoemparejadas.

Temática

Bioinformática

Palabras clave

ADN, MEP, Grafos, UBP's

Primary author(s): TORRES SALAMANCA, Fabián Andrés (Universidad Nacional de Colombia); Dr MOGOL-LÓN-RESTREPO, Ricardo (Grupo de Química Teórica, Universidad Nacional de Colombia); Dr DAZA, Edgar Eduardo (Grupo de Química Teórica, Universidad Nacional de Colombia, Bogotá, Colombia)

Presenter(s): TORRES SALAMANCA, Fabián Andrés (Universidad Nacional de Colombia)

Clasificación de la sesión : Sesión de Posters