

# Estudio Químico-Computacional para la inhibición de la enzima ácido acetohidroxi sintasa, por una sulfonilurea

Gonzalo Alfredo Jaña Villalobos

Tesis para optar al grado de  
Doctor en Ciencias con Mención en Química



Grupo de Química Teórica y Computacional  
Facultad de Ciencias Químicas  
Universidad de Concepción  
Chile

Concepción, Abril de 2010

# Capítulo 1

## Métodos teóricos usados para el estudio de sistemas biológicos

Las enzimas son macromoléculas involucradas en la catálisis y el control de la mayoría de los procesos de la vida. Por lo tanto, la comprensión de su naturaleza catalítica ha sido uno de los principales desafíos en bioquímica [1,2]. Aunque muchas incógnitas con respecto a la naturaleza de la catálisis enzimática han sido resueltas por medio de estudios bioquímicos y estructurales, el origen de su poder catalítico hasta ahora sigue sin ser comprendido a cabalidad, ya que la evidencia empírica sólo permite conocer aspectos generales de la catálisis enzimática, como por ejemplo, velocidades de reacción, efectos alostéricos, mecanismos de inhibición, etc.

Probablemente, la única forma de lograr comprender en detalle el origen de la catálisis enzimática, es mediante el modelamiento y el uso de métodos químico-computacionales [3, 4]. Por lo cual, la evidencia empírica debe ser complementada con herramientas teóricas que permitan incluir los efectos electrónicos que gobiernan a una reacción química, ya que sólo así, se logrará conocer en detalle cuales son los factores, tanto estructurales como electrónicos que contribuyen al origen de la catálisis enzimática [5].

Para el estudio de reacciones químicas, comúnmente se emplean métodos