

Ciencia Latina Revista Científica Multidisciplinar, Ciudad de México, México.
ISSN 2707-2207 / ISSN 2707-2215 (en línea), marzo-abril 2025,
Volumen 9, Número 2.

https://doi.org/10.37811/cl_rcm.v9i2

EVALUACIÓN DE INTERACCIONES DEL ÁCIDO GALACTURÓNICO CON AMINOÁCIDOS A TRAVÉS DE QUÍMICA CUÁNTICA-CUÁNTICA COMPUTACIONAL

**EVALUATION OF GALACTURONIC ACID
INTERACTIONS WITH AMINO ACIDS THROUGH
QUANTUM-COMPUTATIONAL QUANTUM CHEMISTRY**

Laura Maryoris Aguilar Veloz

Universidad Tecnológica de Tecamachalco Puebla, México

Salvador Castro Díaz

Universidad Tecnológica de Tecamachalco Puebla, México

Diana Gómez Flores

Universidad Tecnológica de Tecamachalco Puebla, México

José Arturo Olguín-Rojas

Universidad Tecnológica de Tecamachalco Puebla, México

Carlos Roberto Camarillo Rojas

Universidad Tecnológica de Tecamachalco Puebla, México

Manuel González Pérez

Universidad Tecnológica de Tecamachalco Puebla, México

DOI: https://doi.org/10.37811/cl_rcm.v9i2.17255

Evaluación de Interacciones del Ácido Galacturónico con Aminoácidos a Través de Química Cuántica-Cuántica Computacional

Laura Maryoris Aguilar Veloz¹l.aguilar.veloz@personal.uttecama.edu.mx<https://orcid.org/0000-0002-2059-8586>Universidad Tecnológica de Tecamachalco
Puebla, México**Salvador Castro Díaz**s.castro.diaz@personal.uttecama.edu.mx<https://orcid.org/0000-0001-7814-0116>Universidad Tecnológica de Tecamachalco
Puebla, México**Diana Gómez Flores**d.gomez.flores@personal.uttecama.edu.mx<https://orcid.org/0000-0002-3847-0554>Universidad Tecnológica de Tecamachalco
Puebla, México**José Arturo Olguín-Rojas**j.a.olguin.rojas@personal.uttecama.edu.mx<https://orcid.org/0000-0001-5280-1043>Universidad Tecnológica de Tecamachalco
Puebla, México**Carlos Roberto Camarillo Rojas**c.r.camarillo@personal.uttecama.edu.mx<https://orcid.org/0009-0008-3398-6386>Universidad Tecnológica de Tecamachalco
Puebla, México**Manuel González Pérez**m.gonzalez.perez@personal.uttecama.edu.mx<https://orcid.org/0000-0001-8700-2866>Universidad Tecnológica de Tecamachalco
Puebla, México

RESUMEN

Las pectinas son heteropolianiones con fragmentos de homo-, ramnosa-I y ramnosa-II galacturonanos. El ácido D-galacturónico (AGalU) es el principal constituyente de las pectinas y sus derivados, que muestran múltiples beneficios para la salud. Considerando la probabilidad de interacción de AGalU y oligogalacturónidos derivados del ácido con aminoácidos y proteínas, es importante estudiar el comportamiento de estas moléculas en tales interacciones. Para este propósito, se desarrolló un enfoque in-silico, basado en un modelo cuántico semi-empírico parametrizado SE-PM3, en un simulador Hyperchem, calculando las variables HOMO-LUMO, band gap, potencial electrónico y coeficiente de transferencia de electrones (ETC, siglas en inglés) de las interacciones. De acuerdo con los valores de ETC, en interacciones intermoleculares entre moléculas similares, solo Arg, Met, His y Tyr mostraron mayor reactividad que AGalU. En interacciones reticuladas, Arg, His, Trp, Met, Tyr, Pro, Lys, Phe, Cys, Gly, Leu, Val, Ile, Ala, Asn y Thr fueron oxidadas preferentemente por AGalU a expensas de las interacciones hidrofóbicas e iónicas. El estudio demostró que AGalU actúa predominantemente como agente oxidante para la mayoría de los aminoácidos en interacciones hidrofóbicas o iónicas.

Palabras clave: pectinas, ácido galacturónico, simulación computacional, química cuántica, coeficiente de transferencia electrónica

¹ Autor principal

Correspondencia: m.gonzalez.perez@personal.uttecama.edu.mx

Evaluation of Galacturonic Acid Interactions with Amino Acids through Quantum-Computational Quantum Chemistry

ABSTRACT

Pectins are heteropolyanions with homo-, rhamnose-I, and rhamnose-II galacturonan fragments. D-galacturonic acid (AGalU) is the main constituent of pectins and their derivatives, which show multiple health benefits. Considering the probability of interaction of AGalU and oligogalacturonides derived from the acid with amino acids and proteins, it is important to study the behavior of these molecules in such interactions. For this purpose, an in-silico approach was developed, based on a parameterized semi-empirical quantum model SE-PM3, in a Hyperchem simulator, calculating the HOMO-LUMO, band gap, electronic potential and electron transfer coefficient (ETC) variables of the interactions. According to the ETC values, in intermolecular interactions between similar molecules, only Arg, Met, His, and Tyr showed greater reactivity than AGalU. In cross-linked interactions, Arg, His, Trp, Met, Tyr, Pro, Lys, Phe, Cys, Gly, Leu, Val, Ile, Ala, Asn, and Thr were preferentially oxidized by AGalU at the expense of hydrophobic and ionic interactions. The study demonstrated that AGalU predominantly acts as an oxidizing agent for most amino acids in hydrophobic or ionic interactions.

Keywords: pectins, galacturonic acid, computational quantum simulation, quantum chemistry, electronic transfer coefficient

*Artículo recibido 08 febrero 2025
Aceptado para publicación: 15 marzo 2025*



INTRODUCCIÓN

Las pectinas y sus derivados se caracterizan por su gran disponibilidad, no toxicidad, biocompatibilidad, biodegradabilidad y propiedades tecnofuncionales interesantes, por lo que cuentan con un amplio espectro de aplicaciones durante la elaboración y conservación de alimentos (Martau, Mihai y Vodnar, 2019; 2020; Lee et al., 2021; Aguilar-Veloz et al., 2021, Rubiano et al., 2022). Por otra parte, en décadas anteriores fue demostrado en plantas, que los oligogalacturónidos ejercen un efecto inductor sobre los procesos de diferenciación de embriones somáticos e incrementan el rendimiento de varios cultivos (Izquierdo, 2009), Lara, Costales y Falcón (2018). De igual manera, se ha reconocido, que las pectinas y sus derivados cuentan con diversas actividades biológicas, importantes para el cuidado de la salud, incluyendo propiedades fisiológicas, inmunomoduladoras, antiinflamatorias y anticancerígenas, de tal manera que la consideran un alimento funcional (Wikiera, Irla y Mika, 2014; Martau, Mihai y Vodnar, 2019; Zaitseva et al., 2020; Ensayo clínico NCT01681823, 2020; Wu et al. 2022, Niu et al., 2023; Yue et al., 2023; An et al., 2024).

Desde el punto de vista estructural, las pectinas son heteropolianiones de masa molecular variable (50-705 kDa), con fragmentos de homogalacturonano (HG), ramnogalacturonano I (RGI) y ramnogalacturonano II (RGII). El HG es un polímero lineal compuesto por unidades de α -D-AGalU, unidas por enlaces α (1-4)-glucosídicos. El RG-I está compuesto por una unidad estructural disacáridica de AGalU y ramnosa, mientras que el RG-II constituye una secuencia de siete a nueve residuos de α -D-AGalU, unidos por enlaces 1 \rightarrow 4 con cuatro cadenas laterales heteropoliméricas (Lara-Espinoza et al., 2019; Niu et al., 2023). A pesar de que la pectina se compone de moléculas de diferentes azúcares, el residuo de AGalU es el principal constituyente. El D-AGalU es un ácido, un derivado oxidado de la D-galactosa. En su forma abierta, tiene un grupo aldehído en C1 y un grupo carboxílico en C6 (Lara-Espinoza et al., 2019). Dadas las características estructurales de las pectinas, en particular su contenido de AGalU, resulta interesante entender los mecanismos de interacción de esta molécula y sus derivados con aminoácidos y proteínas. Incluso, se plantea que el grado de polimerización de los OGUes es el factor estructural que más influye en sus funciones biológicas (Izquierdo, 2009). En este sentido, en las últimas décadas, los métodos de química cuántica computacional han captado la atención de la comunidad científica, considerando la oportunidad de predecir interacciones moleculares y propiedades



de las sustancias, utilizando la teoría del coeficiente de transferencia de electrones (ETC) (Živković, 1983; González-Pérez, 2017a; González-Pérez, 2017b; Ahuactzin-Pérez et al., 2018). El ETC es un número que evidencia cuántas veces una molécula necesita su potencial electrostático para que un electrón pase de la condiciones HOMO (orbital molecular abundante en electrones) a LUMO (orbital molecular deficiente en electrones). Las energías HOMO y LUMO muestran la transferencia de carga dentro de la molécula y también en interacción con otra molécula de la misma especie química o diferente (González-Pérez, 2017a). De esta manera, la química cuántica puede ser una herramienta tecnológica interesante para investigar la relación entre las características estructurales de derivados de polisacáridos y sus propiedades químicas y tecnofuncionales. Sobre la base de estos principios, el objetivo del presente trabajo fue analizar el comportamiento del AGalU, específicamente su interacción con aminoácidos y proteínas, mediante el uso de método cuántico semiempírico.

METODOLOGÍA

La interacción molecular del AGalU con aminoácidos y/o proteínas se evaluó mediante la determinación del ETC, mediante el uso de la metodología establecida por González-Pérez (2017b). Para el cálculo del ETC se aplicó el método semiempírico PM3 (SE-PM3). Las propiedades moleculares y las características cuánticas se determinaron utilizando el simulador Hyperchem. La geometría molecular fue optimizada por el método de Polak Ribiere (Gómez-Flores et al., 2024). Según esta teoría, el ETC se calcula en radios de Bohr (a°), utilizando las ecuaciones 1, 2 y 3:

$$BP = |\text{HOMO} - \text{LUMO}| \dots\dots\dots (\text{Eq. 1})$$

$$PE = |(\delta^-) - (\delta^+)| \dots\dots\dots (\text{Eq.2})$$

$$\text{ETC} = Bg/ EP \dots\dots\dots (\text{Eq. 3})$$

where: BP = banda prohibida, PE = potencial electrostático, ETC = coeficiente de transferencia electrónica, and δ = densidad electrónica (González-Pérez, 2017b).

BP es la diferencia absoluta entre los valores de HOMO ($+\delta$) y LUMO ($-\delta$) o la energía requerida por un electrón o nube electrónica para pasar de una molécula a otra, mientras que PE se define como la diferencia absoluta de potencial electrostático de cada polo, en relación con la interacción entre las moléculas.



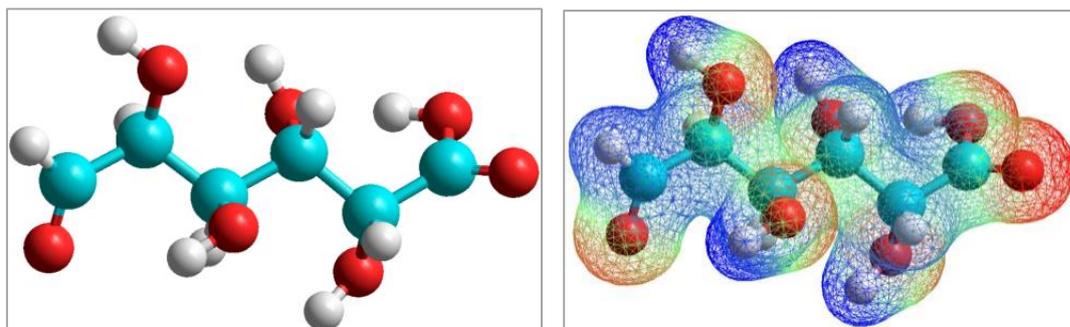
El procesamiento estadístico de los datos de ETC se realizó por un análisis de varianza (ANOVA) de un factor, considerando un nivel de significancia de 0.05.

RESULTADOS Y DISCUSIÓN

Representación molecular del AGalU

En la figura 1 (a) se presenta la molécula del AGalU, la cual corresponde a la forma oxidada de la D-galactosa, constituyendo un ácido urónico o azúcar ácido. Presenta dos grupos, un grupo carbonilo en C1 y un carboxilo en C6. En la figura 1 (b) se muestra la representación molecular del AGalU, según la teoría clásica. Según los cálculos para determinar el potencial electrostático, se obtuvieron valores de PE, de $\square\square = -0.144 \text{ eV/a}^\circ$ y $+\square = 0.203 \text{ eV/a}^\circ$ (Figura 1b).

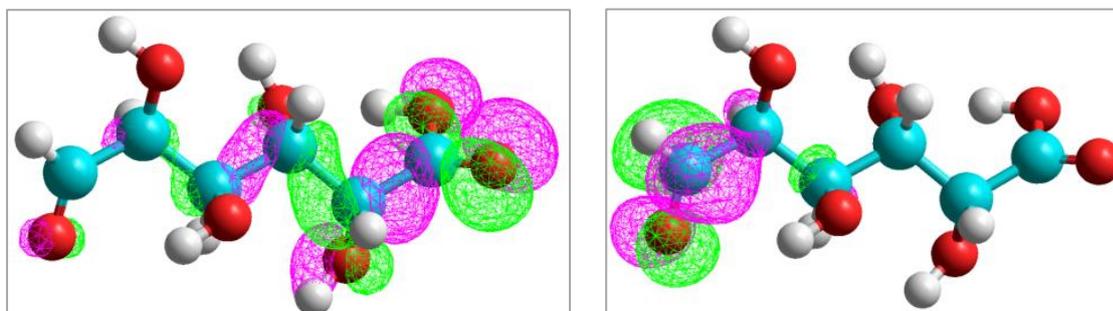
Figura 1. Caracterización molecular cuántica del AGluU: (A)- estructura química y (B)- configuración electrónica.



A) AGalU. C = azul, O = rojo, H = blanco. B)AGalU . PE= $\square\square = -0.144 \text{ eV/a}^\circ$; $+\square = 0.203 \text{ eV/a}^\circ$.

En la figura 2, según la distribución de los colores (verde y fucsia), que se corresponden con las bandas HOMO y LUMO respectivamente, estas se alternan a lo largo de la molécula del AGalU, lo que implica una diferencia de potencial, que influye en la reactividad del compuesto.

Figura 2. Determinación de regiones HOMO y LUMO en la molécula de AGalU según teoría de química cuántica



A)AGlu HOMO = -10.80047 eV

B) AGlu LUMO = -0.178 eV

A continuación, se evaluó el comportamiento del AGaU en interacciones con aminoácidos y proteínas.

Interacción intermolecular entre moléculas similares

Se determinaron los parámetros cuánticos de la interacción entre las propias moléculas de AGaU, así como entre las moléculas de los 20 aminoácidos principales, que forman parte de la estructura primaria de las proteínas. En la Tabla 1, se incluyen los valores de ETC de las interacciones, organizados en orden descendente, por su energía, según se disponen en el pozo cuántico.

Tabla 1. Comportamiento de AGaU y aminoácidos en interacciones con moléculas similares.

No.	Agente Reductor	Agente Oxidante	HOMO	LUMO	BP	E-	E+	PE	ETC (a°)
5	A GalU	AGaU	-10.800	-0.178	10.623	-0.144	0.203	0.347	30.613
4	Tyr	Tyr	-9.056	0.293	9.349	-0.123	0.193	0.316	29.584
3	His	His	-9.307	0.503	9.811	-0.169	0.171	0.340	28.855
2	Met	Met	-9.062	0.145	9.207	-0.134	0.192	0.326	28.243
1	Arg	Arg	-9.176	0.558	9.734	-0.165	0.199	0.364	26.742

BP = banda prohibida en eV, E = densidad electrónica en eV/a₀, PE = potencial electrostático en eV/a₀, ETC = coeficiente de transferencia de electrones en a₀ (radio de Bohr).

Los menores valores de ETC corresponden a compuestos que tendrán una mayor probabilidad de estar involucrados en reacciones metabólicas (González, 2017b). En este caso, sólo se muestran en la tabla los resultados relacionados con los aminoácidos que mostraron mayor capacidad de reacción entre sí, según los valores de ETC, que fueron inferiores al de la interacción de moléculas del AGaU (30.613 a°).

Como se observa en la tabla 1, los aminoácidos que evidenciaron mayor reactividad fueron Arg, Met, His y Tyr, ubicados en el pozo cuántico antes del AGaU. Por ejemplo, en el caso de la Arg, el ETC es 26.742 a°. Esto significa que la distancia que saltará un electrón desde la región HOMO de una primera molécula de Arg a la región LUMO de una segunda molécula de Arg, será sólo 26.742 veces el radio de Bohr (0.5 Amstrong). La mayor distancia a saltar por el electrón, equivalente a 45.188 veces el radio de Bohr, se obtuvo para Val (datos no mostrados).



Comportamiento de AGaU en interacción con aminoácidos

En la Tabla 2 se muestra el comportamiento durante las probables interacciones cruzadas del AGaU con los 20 aminoácidos. Como se observa, exhiben menores valores de ETC, las interacciones donde el AGaU actúa como agente oxidante. En orden ascendente, según los valores del ETC, entre los primeros aminoácidos que exhiben más afinidad por el ácido se incluyen Arg, His, Trp, Met, Tyr, Pro, Lys, Phe, Cys, Gly, Leu, Val, Ile, Ala, Asn y Thr con valores menores a 30.00 veces el radio de Bohr, siendo interacciones incluidas en el primer cuartil del pozo cuántico, según los valores de energía.

Para argumentar los resultados obtenidos, debemos analizar las características de los aminoácidos, según la estructura de sus cadenas laterales. Entre los aminoácidos con menor ETC, Arg, His, Tyr, Lys y Cys, cuentan con cadenas laterales ionizables, por lo que actúan como potentes nucleófilos, favoreciendo la bioconjugación con otras moléculas como el AGaU y oligogalacturónidos (González-Solís *et al.*, 2015). Por otra parte, si tenemos en cuenta que, a menor distancia del salto de electrones, resulta mayor la afinidad química entre las moléculas (González, 2017a, b), Arg e His exhiben una mayor afinidad con el AGaU, lo que puede dificultar la interacción de estos aminoácidos con otras moléculas.

Tabla 2. Comportamiento de AGaU como agente reductor y oxidante vs aminoácidos, en cuanto a su posición en el pozo cuántico.

No.	Agente Reductor	Agente Oxidante	HOMO	LUMO	BP	E-	E+	PE	ETC (a°)
40	AGaU	Leu	-10.800	0.922	11.723	-0.144	0.130	0.274	42.783
39	AGaU	Ala	-10.800	0.749	11.550	-0.144	0.132	0.276	41.846
38	AGaU	Phe	-10.800	0.283	11.084	-0.144	0.127	0.271	40.900
37	AGaU	Gly	-10.800	0.902	11.702	-0.144	0.159	0.303	38.621
36	AGaU	Cys	-10.800	-0.236	10.565	-0.144	0.140	0.284	37.200
35	AGaU	Trp	-10.800	0.133	10.933	-0.144	0.155	0.299	36.565
34	AGaU	His	-10.800	0.503	11.304	-0.144	0.171	0.315	35.884
33	AGaU	Ile	-10.800	0.972	11.772	-0.144	0.188	0.332	35.458
32	AGaU	Thr	-10.800	0.832	11.632	-0.144	0.191	0.335	34.724
31	AGaU	Lys	-10.800	0.943	11.743	-0.144	0.195	0.339	34.641
30	AGaU	Pro	-10.800	0.792	11.592	-0.144	0.191	0.335	34.604
29	AGaU	Gln	-10.800	0.755	11.555	-0.144	0.192	0.336	34.391
28	AGaU	Asn	-10.800	0.644	11.445	-0.144	0.193	0.337	33.960

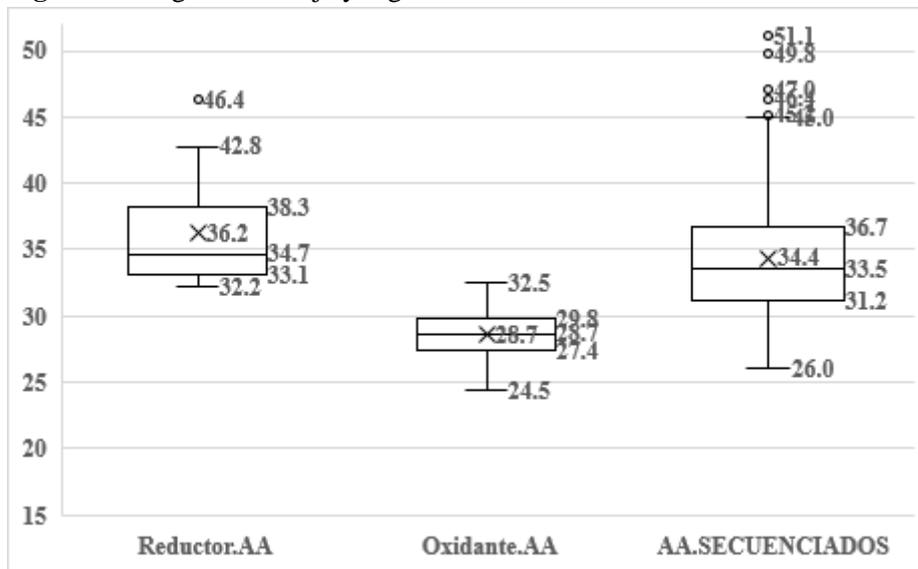
27	AGalU	Ser	-10.800	0.565	11.365	-0.144	0.198	0.342	33.232
26	AGalU	Arg	-10.800	0.558	11.358	-0.144	0.199	0.343	33.115
25	AGalU	Tyr	-10.800	0.293	11.093	-0.144	0.193	0.337	32.917
24	AGalU	Glu	-10.800	0.438	11.239	-0.144	0.201	0.345	32.576
23	AGalU	Met	-10.800	0.145	10.946	-0.144	0.192	0.336	32.576
22	Glu	AGalU	-10.374	-0.178	10.196	-0.111	0.203	0.314	32.473
21	AGalU	Asp	-10.800	0.420	11.221	-0.144	0.204	0.348	32.243
20	Ser	AGalU	-10.156	-0.178	9.979	-0.108	0.203	0.311	32.086
19	Asp	AGalU	-10.370	-0.178	10.192	-0.118	0.203	0.321	31.751
18	AGalU	AGalU	-10.800	-0.178	10.623	-0.144	0.203	0.347	30.613
17	Gln	AGalU	-10.023	-0.178	9.845	-0.124	0.203	0.327	30.108
16	Thr	AGalU	-9.896	-0.178	9.719	-0.123	0.203	0.326	29.812
15	Asn	AGalU	-9.929	-0.178	9.751	-0.125	0.203	0.328	29.730
14	Ala	AGalU	-9.879	-0.178	9.701	-0.124	0.203	0.327	29.667
13	Ile	AGalU	-9.872	-0.178	9.694	-0.128	0.203	0.331	29.288
12	Val	AGalU	-9.914	-0.178	9.736	-0.131	0.203	0.334	29.150
11	Leu	AGalU	-9.645	-0.178	9.468	-0.126	0.203	0.329	28.777
10	Gly	AGalU	-9.902	-0.178	9.725	-0.137	0.203	0.340	28.602
9	Cys	AGalU	-9.639	-0.178	9.461	-0.129	0.203	0.332	28.497
8	Phe	AGalU	-9.553	-0.178	9.375	-0.126	0.203	0.329	28.496
7	Lys	AGalU	-9.521	-0.178	9.343	-0.127	0.203	0.330	28.312
6	Pro	AGalU	-9.447	-0.178	9.269	-0.128	0.203	0.331	28.002
5	Tyr	AGalU	-9.056	-0.178	8.878	-0.123	0.203	0.326	27.234
4	Met	AGalU	-9.062	-0.178	8.884	-0.134	0.203	0.337	26.363
3	Trp	AGalU	-8.299	-0.178	8.121	-0.112	0.203	0.315	25.780
2	His	AGalU	-9.307	-0.178	9.130	-0.169	0.203	0.372	24.542
1	Arg	AGalU	-9.176	-0.178	8.998	-0.165	0.203	0.368	24.452

Por su parte, Met, Pro, Gly, Leu, Val, Ile y Ala cuentan con cadenas laterales alifáticas, son relativamente no polares e intervienen en interacciones hidrofóbicas. La metionina es la más reactiva, por contar con un grupo tioéter al final de su cadena lateral. Luego, sigue la prolina, que cuenta con un anillo pirrolidona con su grupo α -amino. Trp y la Phe contienen cadenas laterales aromáticas, por lo que al igual que los anteriores aminoácidos alifáticos, son relativamente no polares y pueden favorecer interacciones hidrofóbicas. Entre estos, el Trp, exhibe mayor reactividad por su anillo indólico. Asn y Thr son los únicos que exhiben propiedades más polares (González-Solís et al., 2015).



En la figura 3 se muestra el diagrama de caja y bigotes del ETC, que resume los resultados acerca del comportamiento de todas las probables interacciones cruzadas del AGaU con los aminoácidos. Según muestra la figura, predomina la acción del ácido como agente oxidante.

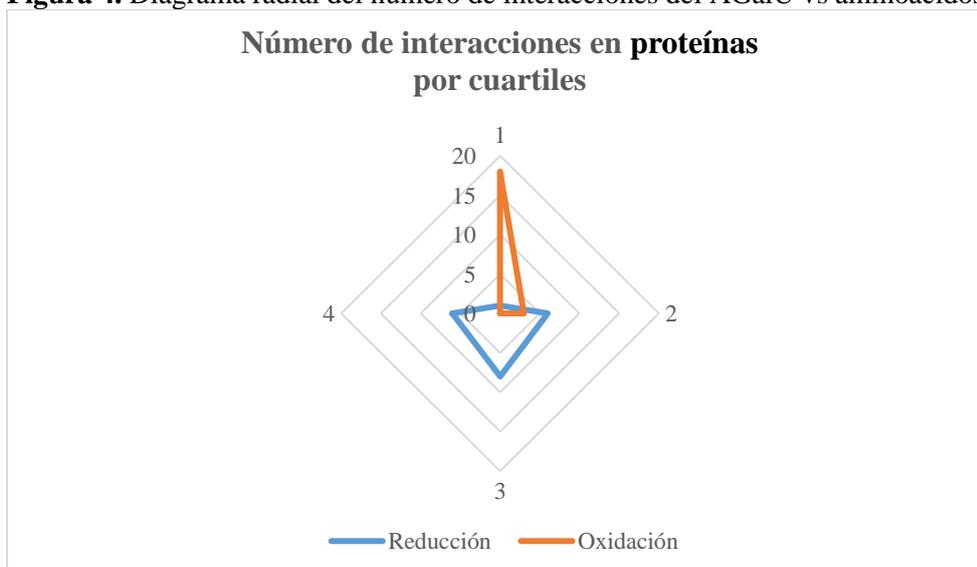
Figura 3. Diagrama de caja y bigotes de valores de ETC de interacciones del AGaU y aminoácidos



El valor medio de ETC (29.9 a°) de las interacciones donde el ácido actúa como oxidante es significativamente menor ($p \leq 0.05$), al valor de las interacciones donde actúa como reductor (34.6 a°).

En la figura 4 se exhibe además el diagrama radial del número de interacciones del AGaU vs aminoácidos, el cual ratifica el predominio del carácter oxidante del ácido (triángulo naranja).

Figura 4. Diagrama radial del número de interacciones del AGaU vs aminoácidos.



En general, las interacciones permiten caracterizar las propiedades reductoras u oxidantes del ácido con respecto a cada aminoácido (González, 2017b). Resulta interesante, que de acuerdo con los valores de ETC, el AGalU exhibe preferentemente propiedades oxidantes, o sea que favorece la pérdida de electrones. Dichos resultados se corresponden con lo que ha sido observado en una amplia variedad de especies de plantas. En este sentido, los diferentes tejidos vegetales han sido muy sensibles a los OGU. La adición de estos compuestos, que están involucrados con los mecanismos de defensa de las plantas, provoca un incremento considerable en la producción de especies reactivas de oxígeno, incluyendo peróxido y oxígeno (Izquierdo, 2009).

Comportamiento de AGalU en interacción con aminoácidos y proteínas

En la Tabla 3 se reflejan las probables combinaciones entre los principales aminoácidos que componen a una proteína y el AGalU. Sin embargo, por cuestiones de espacio, de 461 posibles combinaciones se presentan los resultados de las combinaciones más representativas. En orden descendente se colocan los aminoácidos o proteínas formadas a partir de estos, según su afinidad con el AGalU. De igual manera, que en el caso de la Tabla 2, los que exhiben menores valores del ETC: Arg, His, Trp, Met, Tyr, Pro, Lys, Phe, Cys, Gly, Leu, Val, Ile, Ala, Asn y Thr, con valores menores a 30.00 veces el radio de Bohr, quedan incluidos en el primer cuartil del pozo cuántico y su afinidad es mayor por el AGalU. Teniendo en cuenta, la naturaleza de estos aminoácidos, anteriormente analizada, es evidente que predominan moléculas, que participan fundamentalmente en interacciones de tipo iónica o hidrofóbicas. La mayoría de residuos hidrofóbicos alifáticos y aromáticos se localiza en el interior de las moléculas de proteína o en áreas de interacción con otras estructuras no polares como lípidos, quedando pocos residuos expuestos al agua o a otras moléculas hidrofílicas (González-Solís *et al.*, 2015; Damodaran and Parkin, 2017). Esto sugiere, que el AGalU y sus derivados interactuarán con proteínas, cuya conformación espacial responda a estas características, en dependencia de las condiciones experimentales o fisiológicas.

Entre las interacciones del AGalU con proteínas, una de las reacciones más estudiadas ha sido con la galectina 3. Las galectinas son lectinas del tipo S, que se encuentran ampliamente distribuidas en el tejido animal y están implicadas en respuesta inmunitaria y oncogénesis, mediando la interacción célula-célula, diferenciación, adhesión y motilidad (Gunning, Bongaerts and Morris, 2009).



La galectina 3 es la única proteína quimérica de estas, a la que se unen monómeros u oligómeros. Según la literatura, la interacción específica entre el AGalU y la galectina 3, está mediada por aminoácidos clave, que están ubicados en el sitio de unión de reconocimiento de carbohidratos de la proteína, contribuyen a la especificidad de la unión (Gunning, Bongaerts and Morris, 2009; Wu *et al.*, 2020). De esta manera, los resultados obtenidos en esta investigación resultan de interés para profundizar en las investigaciones acerca de los mecanismos de interacción de Gal 3 con pectina y sus derivados (AGalU y OGU), estudio que se encuentra en desarrollo (De Freitas, Raz y Paulo, 2022).

La determinación del ETC para interacciones de moléculas pequeñas, como AGalU con macromoléculas, en condiciones fisiológicas, es un proceso complejo porque los mecanismos principales de interacción se basan en la acción de fuerzas intermoleculares débiles y de complementariedad estructural (formación de enlaces de hidrógeno, interacciones hidrofóbicas y enlaces iónicos), además de considerar el contexto específico en que ocurre la reacción (Wu *et al.*, 2020). Pero, sin dudas los estudios de simulación molecular permiten modelar las interacciones entre la molécula del AGAIU y otras moléculas, para obtener información sobre la densidad electrónica y la probabilidad de transferencia de electrones en cada caso.

CONCLUSIONES

En la molécula del AGalU las bandas HOMO y LUMO se alternan a lo largo de la molécula, lo que implica una diferencia de potencial, que influye en la reactividad del compuesto. De acuerdo con el comportamiento de los valores del ETC, el estudio químico-cuántico computacional demostró que, en interacciones intermoleculares entre moléculas similares, sólo Arg, Met, His y Tyr evidenciaron mayor reactividad con respecto a las moléculas de AGalU.

En interacciones con los aminoácidos, el AGalU participa preferentemente en calidad de agente oxidante. Los aminoácidos que exhibieron más afinidad por el ácido fueron, en orden descendente, Arg, His, Trp, Met, Tyr, Pro, Lys, Phe, Cys, Gly, Leu, Val, Ile, Ala, Asn y Thr. En la mayoría de los casos predominan las moléculas que participan en interacciones hidrofóbicas y de carácter iónico.



REFERENCIAS BIBLIOGRAFICAS

- Aguilar-Veloz, L.M., Torres-Salinas A.F., Díaz-Ramos, D.I., Brión-Espinoza, I.A., Pérez-Orozco, J.P. & Ortiz, B.R.I. (2021). Avances y perspectivas de aplicación de biopolímeros naturales en la industria agroalimentaria mexicana. En: *Economía Circular-aprovechamiento integral de recursos agroalimentarios*. Sección 01. 1-18. Primera edición, México, 2021, Publicado por el Consejo de Ciencia y Tecnología del Estado de Puebla (CONCYTEP), ISBN: 978-607-99058-7-3.
- Ahuactzin-Pérez, M., Tlecuitl-Beristain, S., García-Dávila, J., Santacruz-Juárez, E., González-Pérez, M., Gutiérrez-Ruiz, M. C., & Sánchez, C. (2018). A novel biodegradation pathway of the endocrine-disruptor di(2-ethyl hexyl) phthalate by *Pleurotus ostreatus* based on quantum chemical investigation. *Ecotoxicology and Environmental Safety*, 147, 494–499. <https://doi.org/10.1016/J.ECOENV.2017.09.004> .
- An, L., Chang, G., Zhang, L., Wang, P., Gao, W., Li, X. (2024). Pectin: Health-promoting properties as a natural galectin-3 inhibitor. *Glycoconjugate Journal*, 41(2):93-118. doi: 10.1007/s10719-024-10152-z.
- Damodaran, S. and Parkin, K.L. (Eds.). (2017). Chapter 5. “Amino Acids, Peptides, and Proteins”. In: *Fennema's Food Chemistry* (5th ed.). CRC Press. 1123 pp. <https://doi.org/10.1201/9781315372914>.
- De Freitas P.L., Raz, A. and Paulo F. J. (2022). The complex biological effects of pectin: galectin-3 targeting as potential human health improvement?. *Biomolecules*, 12(2):289. DOI:10.3390/biom12020289.
- Ensayo clínico NCT01681823 (2020). Effect of modified citrus pectin on PSA Kinetics in biochemical relapsed PC with serial increases in PSA, january 27, 2020 updated by: Registro de ensayos clínicos de EE. UU EcoNugenics. <https://ichgcp.net/es/clinical-trials-registry/NCT01681823>.
- González-Pérez, M. (2017a). Quantum modeling to determine the carcinogenic potential of aflatoxin B1 produced by *Aspegillus* sp and its metabolic derivate aflatoxin M1 Modelamiento cuántico para determinar el potencial cancerígeno de la aflatoxina B1



- producida por *Aspegillus* sp y de su derivado metabólico aflatoxina M1. Original research. *Mexican Journal of Biotechnology*, 2(2), 255–270. <https://doi.org/10.29267/mxjb.2017.2.2.255>.
- González-Pérez, M. (2017b). Quantum theory of the electron transfer coefficient. *International Journal of Advanced Engineering, Management and Science*, 3(10), 1024–1028. <https://doi.org/10.24001/ijaems.3.10.9>.
- González-Solís, A., Gavilanes-Ruíz, M., Plata-Ramos, C., Maya-Ampudia, V., Carmona-Salazar, L., Ponce-Pineda, I.G. (2015). Estructura y función de las Proteínas. En “Compendio de Bioquímica: proteínas, membranas, metabolism”, pp.7-10, 2ª Edición, Marzo 2015, Facultad de Química, UNAM, Proyecto PAPIME 202014, DGAPA, UNAM.
- Gunning, A.P., Bongaerts, R.J., Morris, V.J. (2009). Recognition of galactan components of pectin by galectin-3. *FASEB J.* 2009 Feb; 23(2):415-24. doi: 10.1096/fj.08-106617. Epub 2008 Oct 2. PMID: 18832596.
- Izquierdo, O. H. (2009). Los oligogalacturónidos de origen péctico y su acción en las plantas. *Temas de Ciencia y Tecnología de México*, 13(39), 31-40. https://www.utm.mx/edi_anteriores/Temas39/2NOTAS%2039-1.pdf.
- Lara, D.A, Costales, D.M., Falcón, A. R. (2018). Review Oligogalacturonides in the growth and development of plants. *Cultivos Tropicales*, v. 39, 2, pp. 127-134 abril-junio ISSN impreso: 0258-5936 ISSN digital: 1819-4087.
- Lara-Espinoza, C. E., Carvajal-Milan, E. R., Balandrán-Quintana, Y., López-Franco, A., & Rascón-Chu, A. (2019). Pectin and pectin-based composite materials: Beyond food texture. *Molecules*, 23(4). <https://doi.org/10.3390/molecules23040942>.
- Lee, B. H., Jung, H. T., Kim, H. S., & Yoo, S. H. (2021). Structural and gelling properties of very low methoxyl pectin produced by an alkali-treatment. *Korean Journal of Food Science Technology*, 53, 121~125. <https://doi.org/10.9721/KJFST.2021.53.2.121>.
- Martau, G. A., Mihai, M., & Vodnar, D. C. (2019). Review: The use of chitosan, alginate, and pectin in the biomedical and food sector—biocompatibility, bioadhesiveness, and biodegradability. *Polymers*, 11, 1837. <https://doi.org/10.3390/polym11111837>.



- Monsoor, M. 2005 Effect of drying methods on the functional properties of soy hull pectin. *Carbohydrate Polymers* 61 (3): 362-367.
- Niu, H., Dou, Z., Hou, K., Wang, W., Chen, X., Chen, X., Chen, H., Fu, X. (2023). A critical review of RG-I pectin: sources, extraction methods, structure, and applications. *Critical Reviews of Food Science and Nutrition*. 64 (24):8911-8931. doi: 10.1080/10408398.2023.2204509. Epub 2023 Apr 28. PMID: 37114929.
- Rubiano, G. V., Montaña, N. M., Da Silva, D.N. (2022). Pectinas: extracción, usos e importancia en la agroindustria. *Ciencia Latina Revista Científica Multidisciplinar*, 6 (5):5294-5309. doi. 10.37811/cl_rcm.v6i5.3498.
- Wikiera, A., Irla, M., Mika, M. (2014). Prozdrowotne właściwości pektyn [Health-promoting properties of pectin]. Review. *Postepy Hig Med Dosw (Online)*, 2, 68: 590-6. Polish. doi: 10.5604/17322693.1102342. PMID: 24864109.
- Wu, D., Zheng, J., Hu, W., Zheng, X., He, Q., Linhardt, R.J., Ye, X., Chen, S. (2020). Structure-activity relationship of citrus segment membrane RG-I pectin against galectin-3: The galectan is not the only important factor. *Carbohydrate Polymers*, 1; 245:116526. doi: 10.1016/j.carbpol.2020.116526.
- Wu, X.Q, Fu, J.Y, Mei, R.Y, Dai, X.J, Li, J.H, Zhao, X.F, Liu, M.Q (2022). Inhibition of Liver Cancer HepG2 cell proliferation by enzymatically prepared low-molecular citrus pectin. *Current Pharmaceutical Biotechnology*, 23(6):861-872. doi: 10.2174/1389201022666210729122631. PMID: 34376132.
- Yue, Y., Wang, B., Xi, W., Liu, X., Tang, S., Tan, X., Li, G., Huang, L., Liu, Y., Bai, J. (2023). Modification methods, biological activities and applications of pectin: A review. *International Journal of Biological Macromolecules*, 253, Part 8, 31,127523. <https://doi.org/10.1016/j.ijbiomac.2023.127523>.
- Zaitseva O, Khudyakov A, Sergushkina M, Solomina O, Polezhaeva T. (2020) Pectins as a universal medicine. *Fitoterapia*, Oct;146:104676. doi: 10.1016/j.fitote.2020.104676.
- Živković, T. P. (1983). Molecular orbital resonance theory: A new approach to the treatment of quantum chemical problems. *Theoretica Chimica Acta*. 62(4): 335-350.

