



Ciencia Latina Revista Científica Multidisciplinar, Ciudad de México, México.  
ISSN 2707-2207 / ISSN 2707-2215 (en línea), julio-agosto 2025,  
Volumen 9, Número 4.

[https://doi.org/10.37811/cl\\_rcm.v9i2](https://doi.org/10.37811/cl_rcm.v9i2)

**ANÁLISIS DE LAS INTERACCIONES ENTRE  
INULINA, GLUCOSA Y MICROBIOTA INTESTINAL:  
UN ENFOQUE DESDE LA QUÍMICA CUÁNTICA  
APLICADA**

**ANALYSIS OF THE INTERACTIONS BETWEEN INULIN,  
GLUCOSE, AND INTESTINAL MICROBIOTA: AN APPROACH  
FROM APPLIED QUANTUM CHEMISTRY**

**Jesica Vianney Hernández Morales**

Centro de Estudios Superiores de Tepeaca, México

**Nancy Beatriz Sánchez Barrientos**

Centro de Estudios Superiores de Tepeaca, México

**Elí Hernández Jiménez**

Centro de Estudios Superiores de Tepeaca, México

**Lizzet Karina Espinosa Ojeda**

Centro de Estudios Superiores de Tepeaca, México

**Karla Elisa Valencia Rojas**

Centro de Estudios Superiores de Tepeaca, México

**Diego Matheis Celis**

Universidad Veracruzana, México

**Manuel González Pérez**

Universidad Tecnológica de Tecamachalco Enlace SECIHTI

**Cecilia Vázquez González**

Universidad Tecnológica de Tecamachalco

DOI: [https://doi.org/10.37811/cl\\_rcm.v9i3.18512](https://doi.org/10.37811/cl_rcm.v9i3.18512)

## **Análisis de las Interacciones entre Inulina, Glucosa y Microbiota Intestinal: un Enfoque desde la Química Cuántica Aplicada**

**Jesica Vianney Hernández Morales<sup>1</sup>**

[vianneym423@gmail.com](mailto:vianneym423@gmail.com)

<https://orcid.org/0009-0003-2184-6654>

Centro de Estudios Superiores de Tepeaca  
Programa Delfín 2025  
México

**Nancy Beatriz Sánchez Barrientos**

[sanchez890beatriz@gmail.com](mailto:sanchez890beatriz@gmail.com)

Centro de Estudios Superiores de Tepeaca  
Programa Delfín 2025  
México

**Elí Hernández Jiménez**

[lfrehf@gmail.com](mailto:lfrehf@gmail.com)

<https://orcid.org/0009-0001-1656-2679>

Centro de Estudios Superiores de Tepeaca  
Programa Delfín 2025  
México

**Lizzet Karina Espinosa Ojeda**

[ojedalizzet381@gmail.com](mailto:ojedalizzet381@gmail.com)

<https://orcid.org/0009-0008-9902-7882>

Centro de Estudios Superiores de Tepeaca  
Programa Delfín 2025  
México

**Karla Elisa Valencia Rojas**

[karlavalenciarojas@gmail.com](mailto:karlavalenciarojas@gmail.com)

<https://orcid.org/0009-0003-6230-2098>

Centro de Estudios Superiores de Tepeaca  
Programa Delfín 2025  
México

**Diego Matheis Celis**

[bdiegotatheiscelis@gmail.com](mailto:bdiegotatheiscelis@gmail.com)

<https://orcid.org/0009-0004-4779-890X>

Universidad Veracruzana Facultad de Ciencias  
Químicas  
Programa Delfín 2025  
México

**Manuel González Pérez**

[dr.manuelgonzalezperez@gmail.com](mailto:dr.manuelgonzalezperez@gmail.com)

<https://orcid.org/0000-0001-8700-2866>

Universidad Tecnológica de Tecamachalco  
Enlace SECIHTI  
Programa Delfín 2025  
México

**Cecilia Vázquez González**

[c.vazquez.gonzalez@personal.uttecama.edu.mx](mailto:c.vazquez.gonzalez@personal.uttecama.edu.mx)

<https://orcid.org/0000-0002-4512-1119>

Universidad Tecnológica de Tecamachalco.  
Programa Delfín 2025  
México

### **RESUMEN**

La Inulina (INL) es una fibra soluble y no digerible que se encuentra presente en más de 36000 especies de vegetales, principalmente en hortalizas como son la cebolla, el ajo, la alcachofa, el agave, entre otras, como un polisacárido de reserva. Las moléculas objeto de estudio fueron construidas mediante el software HyperChem. Los cálculos cuánticos se realizaron aplicando el método semiempírico SE-PM3 y para la optimización geométrica; con el objetivo de localizar el estado de menor energía de formación; se empleó el algoritmo de gradiente conjugado de Polak–Ribiere. Los resultados arrojan que la INL es un agente mayormente oxidante de los aminoácidos (AAs) del cuerpo humano y por lo tanto es poco antioxidante; además los cálculos comparativos y curvas de Morse con nos dan un resultado de que la glucosa (GLU) en exceso oxida a la INL. Como conclusión general hallamos que la inulina es bloqueada en forma oxidativa por la GLU en exceso.

**Palabras clave:** inulina, glucosa, microbiota intestinal, química cuántica, Hyperchem

---

<sup>1</sup> Autor principal.

Correspondencia: [dr.manuelgonzalezperez@gmail.com](mailto:dr.manuelgonzalezperez@gmail.com)

# Analysis of the Interactions between Inulin, Glucose, and Intestinal Microbiota: An Approach from Applied Quantum Chemistry

## ABSTRACT

Inulin (INL) is a soluble, non-digestible fiber found in more than 36,000 plant species, primarily in vegetables such as onion, garlic, artichoke, and agave, among others, as a reserve polysaccharide. The molecules under study were constructed using HyperChem software. Quantum calculations were performed using the semiempirical SE-PM3 method, and the Polak–Ribiere conjugate gradient algorithm was used for geometric optimization to locate the state with the lowest formation energy. The results show that INL is primarily an oxidizing agent of amino acids (AAs) in the human body and is therefore a poor antioxidant. Comparative calculations and Morse curves indicate that excess glucose oxidizes INL. As a general conclusion, we find that inulin is blocked oxidatively by excess glucose.

**Keywords:** inulin, glucose, gut microbiota, quantum chemistry, Hyperchem

*Artículo recibido 22 mayo 2025*

*Aceptado para publicación: 27 junio 2025*



## INTRODUCCIÓN

La INL es una fibra soluble y no digerible que se encuentra presente en más de 36000 especies de vegetales, principalmente en hortalizas como son la cebolla, el ajo, la alcachofa, el agave, entre otras, como un polisacárido de reserva. (Qin, Wang et al., 2023) La INL se usa ampliamente en los alimentos procesados como un reemplazo de grasa o azúcar o para impartir características deseables y solo proporciona 25-35% de energía en comparación con los carbohidratos digeribles. (Shoaib, et al., 2016) Se encuentra compuesta principalmente por cadenas lineales de unidades de fructosa unidas mediante enlaces  $\beta$ -(2 $\rightarrow$ 1), y generalmente terminadas por una molécula de GLU. Su fórmula empírica puede representarse como  $((C_6 H_{10} O_5)_n)$ , donde  $n$  varía según la longitud de la cadena, que puede ir de 2 hasta más de 60 unidades. (Madrigal y Sangronis., 2007)

La INL posee distintas propiedades, es rica en fibra lo que hace que pase por el tracto gastrointestinal sin digerirse, como prebiótica en el colón ya que es fermentada selectivamente por la microbiota de forma beneficiosa, se transforma en ácidos grasos de cadena corta (como acetato, propionato y butirato), lactato, gases y sustrato bacteriano además es baja en grasas y azúcares. (Shoaib, et al., 2016).

### Microbiota intestinal

Los fructanos del tipo INL son fibras de uso común que se consideran prebióticas por su capacidad al ser utilizadas por la microbiota intestinal confiriendo beneficios a la salud, según estudios realizados en poblaciones adultas sanas sugieren que tiene un efecto prebiótico en la microbiota intestinal, promoviendo la abundancia de *Bifidobacterium*, *Lactobacillus* y *Faecalibacterium prausnitzii* sin ocasionar efectos dañinos a la salud, se encontró en otros estudios que la abundancia de *Bacteroides* se ha visto aumentada en algunos estudios, disminuida en otros y en caso del *Clostridium* mostró descensos, aumentos o estabilidad según los casos, además de que proporciona efectos como una mejor función de la barrera intestinal, una mejor laxación lo que se comprobó a través de un ensayo con 6,4 g/día de scFOS redujo significativamente el tiempo de tránsito y aumento la frecuencia de deposiciones, se encontró que también ocasiona un aumento significativo de las flatulencias en 19 de 37 estudios realizados además de que pueden presentarse síntomas como dolor abdominal y distensión dependiendo de la dosis estos tienden a disminuir con el tiempo reflejando adaptación a la suplementación con INL. (Hughes RL., et al., 2022)



## **Metabolismo lipídico**

Los fructanos de tipo INL por su efecto prebiótico al estimular selectivamente el crecimiento o actividad de ciertas bacterias intestinales tienen cierta eficacia en la reducción de lípidos en sujetos con hiperlipidemia pero sin efectos en individuos normolipidémicos ya que se observa menor actividad y expresión (-40 % de ARNm) de enzimas clave de la síntesis de ácidos grasos (acetil-CoA carboxilasa, FAS, enzima málica, ATP-citratoliasa y G6PDH), además en el catabolismo lipídico incrementan la lipoproteína lipasa muscular (↑70 % de ARNm), favoreciendo la hidrólisis de triglicéridos circulantes y reduciendo su péptido aterogénico. Además, al fermentar la microbiota intestinal reduce el pH intestinal, precipitando ácidos biliares y aumentando su eliminación, cambia la proporción de conjugados de bilis aumentando la glicina y disminuyen tauro-CDCA, lo que estimula síntesis hepática de sales y depleción de colesterol. Además, incrementa los ácidos grasos de cadena corta ocasionando que el propionato, butirato y acetato inhiban la lipogénesis y la HMG-CoA reductasa, favoreciendo la redistribución hepática de colesterol y estimulan la producción de hormonas saciogénicas y la homeostasis glucolipídica. (Reis SA., ET AL., 2015)

## **Glucemia**

La diabetes mellitus II es una enfermedad la cual su prevalencia sigue aumentando significativamente a un ritmo agigantado, además de que existen diversas patologías que son importantes factores de riesgo para el desarrollo de la misma entre ellas la más importante es la obesidad que ocasiona resistencia a la insulina en el hígado, células musculares y tejido adiposo, esto empeora con las dietas de alto índice glucémico y alimentos enriquecidos con sacarosa los cuales pueden agravar la incidencia de episodios de disglucemias. Diversos estudios han demostrado que el consumo de una dieta rica en fibra ralentiza la absorción de GLU, de modo que el azúcar se libera de manera más pausada en el organismo, lo que puede disminuir los niveles de insulina posprandial. Por lo que el papel de la INL y los fructooligosacáridos han demostrado ser eficaces para estabilizar la respuesta glucémica, en experimentos realizados en ratas diabéticas fue estudiada administrando una dieta que contenía polvo de alcachofa de Jerusalén en proporciones del 5, 10 y 15 %, donde se logró comprobar que tiene un efecto en la disminución significativa de la glucemia en todos los grupos. (Ahmed W, Rashid S., 2019)

Sin embargo, según estudios realizados en humanos el efecto de la INL sobre el control glucémico solo



se demostró en pacientes diagnosticados con diabetes mellitus II, aun así, no existe información suficiente al respecto. (Liu F., et al., 2017)

Por lo cual con este artículo se pretende comprobar el efecto de la INL, sobre los niveles de glucemia y la microbiota intestinal utilizando química cuántica, para así corroborar si realmente tiene efectos sobre la disminución de los niveles de glucemia, y así considerarse como posible tratamiento alternativo para la hiperglucemia.

## **METODOLOGÍA**

Las moléculas objeto de estudio fueron construidas mediante el software HyperChem. Los cálculos cuánticos se realizaron aplicando el método semiempírico SE-PM3, y para la optimización geométrica —con el objetivo de localizar el estado de menor energía de formación— se empleó el algoritmo de gradiente conjugado de Polak–Ribiere. Se determinaron los niveles energéticos HOMO y LUMO, así como los valores de  $E^-$  y  $E^+$ , a partir de los cuales se derivaron tanto la banda prohibida como el potencial electrostático, cuyos datos se presentan en las tablas correspondientes. Como resultado final del análisis computacional, se obtuvo el coeficiente de transferencia electrónica (CTE), expresado en unidades del radio de Bohr ( $a_0$ ). Las ecuaciones utilizadas —derivadas de la ecuación de Schrödinger— no se incluyen por motivos de espacio y por considerarse de conocimiento general en la comunidad científica. Los valores calculados del CTE se interpretaron como constantes de acoplamiento vibracional entre pares moleculares seleccionados de AAs, organizados en combinaciones binarias tanto para el eje AAs como para el Inulina. (González-Pérez, 2017; Sánchez-Parada et al., 2017; Aparicio-Razo et al., 2017)

## **RESULTADOS Y DISCUSIÓN**

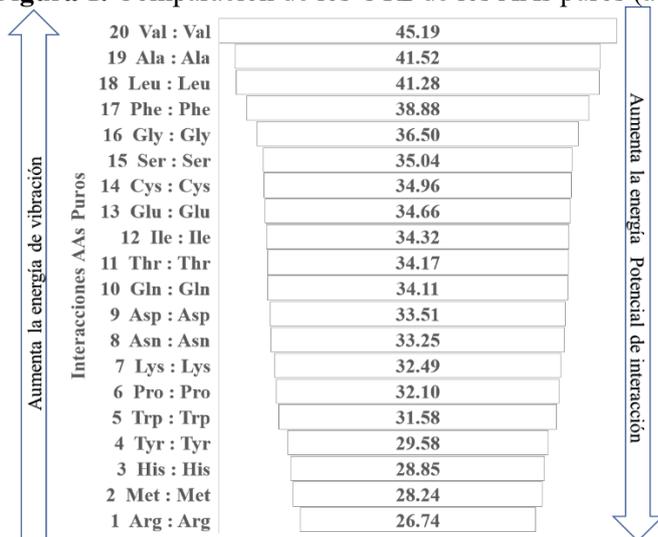
En la figura 1 se muestran los CTEs de cada uno de los AAs puros. La INL tiene un  $CTE = 45.460 a_0$ . Esto significa que la INL supera a todos con la longitud del resorte cuántico de vibración. Ocupa el lugar número 21 del pozo cuántico.

La interpretación de este fenómeno es que la INL puede conservar mayor energía cinética que potencial. En el cuerpo humano, es más probable que sea una sustancia de acción no prolongada.

En cambio, la Arg es una AA que tiene mucha energía potencial y poca energía cinética. Este fenómeno hace que la Arg sea de acción prolongada, cuando está suelta en el sistema. Debe presentar alta afinidad química, con los otros AAs.



**Figura 1.** Comparación de los CTE de los AAs puros (a0)

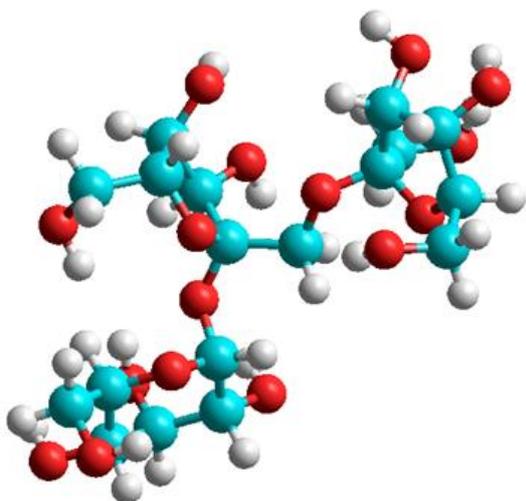


En la figura 2 se presenta la caracterización de la molécula de INL.

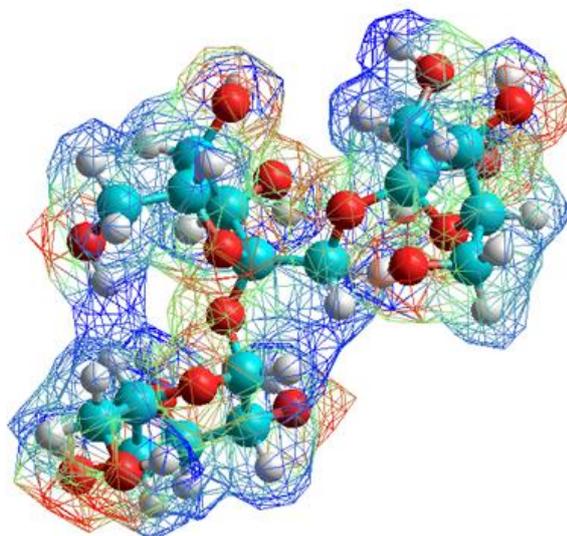
- A) Se presenta la molécula de INL pura: O = rojo, C = Cian, H = blanco.
- B) Se muestra la nube del potencial electrostático de acuerdo a la química clásica. rojo = negativo, verde = neutro, azul = positivo.
- C) Vemos la nube de HOMO. Verde = espacio arriba del plano de referencia, violeta = espacio debajo del plano de referencia. Espacio con exceso de electrones.
- D) Vemos la nube de LUMO. Verde = espacio arriba del plano de referencia, violeta = espacio debajo del plano de referencia. Espacio con déficit de electrones.

**Figura 2.** Caracterización cuántica de la INL

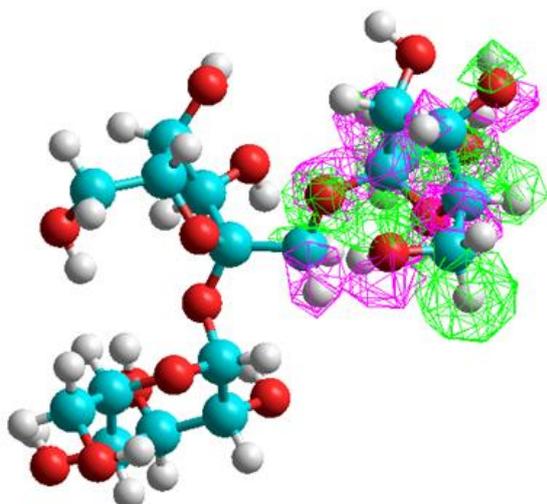
A) Molécula de INL



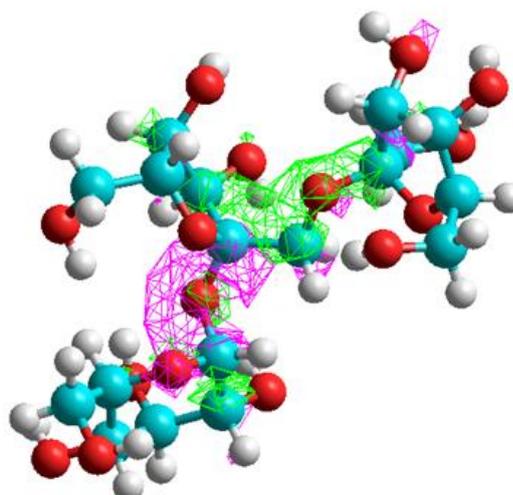
B) Nube del Potencial Electrostático de acuerdo con Química Clásica



C) Nube Electrónica HOMO



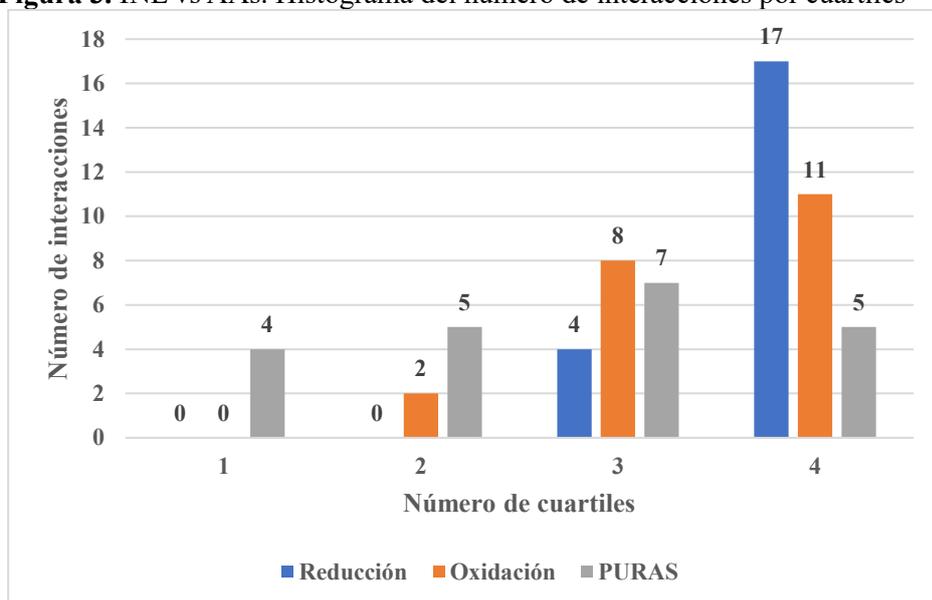
D) Nube Electrónica LUMO



La figura 3 se trata de un histograma que representa la interacción oxido reducción. En la gráfica de barras en el eje de las x representa 4 cuartiles. El eje de las y representa el número de interacciones posibles. En el primer cuartil se muestra el fondo del pozo cuántico, por lo tanto, se observan las interacciones más fuertes y probables. Por lo que no se observa oxidación en el cuartil 1 (barra naranja), esto quiere decir que no tiene actividad oxidante probable fuerte. La reducción más fuerte se muestra en el cuartil 4, esto quiere decir que tampoco es antioxidante. En general, la INL no presenta ni oxidación

ni antioxidación en los AAs; o se da este fenómeno con los AAs en forma muy moderada. Pero en una sobre dosis pueden entrar en función los cuartiles 3 y 4, que son los que presentan REDOX.

**Figura 3.** INL vs AAs. Histograma del número de interacciones por cuartiles



La tabla 1 contiene 10 columnas, en la primera columna se señala el nivel del pozo cuántico. En las columnas 2 y 3 se presentan la relación Redox. De la columna 4 a la 9 se presentan los valores cuánticos calculados según la metodología. La última columna muestra el CTE de cada sustancia.

En el nivel 1(filas del pozo cuántico) localizamos la interacción de la INL como oxidante (izquierda) de la Arginina (derecha). Sucede algo parecido hasta el nivel 5, Histidina, Metionina, Triptófano y Tirosina respectivamente. En el nivel 6 del pozo cuántico localizamos a la INL como antioxidante (izquierda) del Ácido aspártico (derecha).

**Tabla 1.** Interacciones REDOX cuánticas moleculares de la INL y los AAs

No.	Reductor	Oxidante	HOMO	LUMO	BP	E-	E+	EP	CTE
41	INL	Val	-10.808	0.931	11.740	-0.103	0.109	0.212	55.375
40	INL	Leu	-10.808	0.922	11.730	-0.103	0.130	0.233	50.345
39	INL	Ala	-10.808	0.749	11.558	-0.103	0.132	0.235	49.181
38	INL	Phe	-10.808	0.283	11.092	-0.103	0.127	0.230	48.225
37	INL	INL	-10.808	1.193	12.001	-0.103	0.161	0.264	45.460
36	INL	Gly	-10.808	0.902	11.710	-0.103	0.159	0.262	44.695
35	INL	Cys	-10.808	-0.236	10.573	-0.103	0.140	0.243	43.510
34	Glu	INL	-10.374	1.193	11.567	-0.111	0.161	0.272	42.526
33	INL	Trp	-10.808	0.133	10.941	-0.103	0.155	0.258	42.407
32	Ser	INL	-10.156	1.193	11.349	-0.108	0.161	0.269	42.191
31	Asp	INL	-10.370	1.193	11.563	-0.118	0.161	0.279	41.444
30	INL	His	-10.808	0.503	11.312	-0.103	0.171	0.274	41.283
29	INL	Ile	-10.808	0.972	11.780	-0.103	0.188	0.291	40.481
28	INL	Thr	-10.808	0.832	11.640	-0.103	0.191	0.294	39.593

27	INL	Pro	-10.808	0.792	11.600	-0.103	0.191	0.294	39.457
26	INL	Lys	-10.808	0.943	11.751	-0.103	0.195	0.298	39.433
25	Gln	INL	-10.023	1.193	11.216	-0.124	0.161	0.285	39.354
24	INL	Gln	-10.808	0.755	11.563	-0.103	0.192	0.295	39.198
23	Thr	INL	-9.896	1.193	11.089	-0.123	0.161	0.284	39.047
22	Asn	INL	-9.929	1.193	11.122	-0.125	0.161	0.286	38.888
21	Ala	INL	-9.879	1.193	11.072	-0.124	0.161	0.285	38.848
20	INL	Asn	-10.808	0.644	11.453	-0.103	0.193	0.296	38.691
19	Ile	INL	-9.872	1.193	11.065	-0.128	0.161	0.289	38.287
18	Val	INL	-9.914	1.193	11.107	-0.131	0.161	0.292	38.037
17	INL	Ser	-10.808	0.565	11.373	-0.103	0.198	0.301	37.785
16	Leu	INL	-9.645	1.193	10.838	-0.126	0.161	0.287	37.764
15	INL	Arg	-10.808	0.558	11.366	-0.103	0.199	0.302	37.637
14	INL	Tyr	-10.808	0.293	11.101	-0.103	0.193	0.296	37.503
13	Phe	INL	-9.553	1.193	10.746	-0.126	0.161	0.287	37.442
12	Cys	INL	-9.639	1.193	10.832	-0.129	0.161	0.290	37.351
11	Gly	INL	-9.902	1.193	11.095	-0.137	0.161	0.298	37.233
10	Lys	INL	-9.521	1.193	10.714	-0.127	0.161	0.288	37.200
9	INL	Met	-10.808	0.145	10.954	-0.103	0.192	0.295	37.131
8	INL	Glu	-10.808	0.438	11.247	-0.103	0.201	0.304	36.996
7	Pro	INL	-9.447	1.193	10.639	-0.128	0.161	0.289	36.815
6	INL	Asp	-10.808	0.420	11.229	-0.103	0.204	0.307	36.575
5	Tyr	INL	-9.056	1.193	10.249	-0.123	0.161	0.284	36.088
4	Trp	INL	-8.299	1.193	9.491	-0.112	0.161	0.273	34.767
3	Met	INL	-9.062	1.193	10.255	-0.134	0.161	0.295	34.762
2	His	INL	-9.307	1.193	10.500	-0.169	0.161	0.330	31.819
1	Arg	INL	-9.176	1.193	10.369	-0.165	0.161	0.326	31.807

HOMO = Orbital de valencia más ocupado por los electrones (eV). LUMO = Orbital de valencia menos ocupado por los electrones (eV). BG = Banda prohibida (eV). E = Polos electrostáticos (eV/a<sub>0</sub>). PE = Potencial Electrostático (eV/a<sub>0</sub>). CTE = Coeficiente de Transferencia de Electrones (a<sub>0</sub>). (a<sub>0</sub>) = Radios de Bohr

En la tabla 2 se muestra la interacción redox de las sustancias GLU vs INL. En color rojo se observa la interacción oxidante de la INL y de color azul la interacción antioxidante de esta misma.

**Tabla 2.** Comparación del REDOX de la GLU y la INL

La figura 4 nos muestra un esquema de rayas y puntos de los 4 fondos de los pozos cuánticos en acción.

DATA	Nombre	Reductor	Oxidante	HOMO	LUMO	Bg	d-	d+	EP	CTE
SD25	GLU	GLU	GLU	-11.02	2.128	13.148	-0.116	0.169	0.285	46.1333333
SD25	INL	INL	INL	-10.808	0.931	11.740	-0.103	0.109	0.212	55.375
<b>Opción 1</b>	<b>GLU:INL</b>	<b>GLU</b>	<b>INL</b>	<b>-11.02</b>	<b>0.9311865</b>	<b>11.9511865</b>	<b>-0.116</b>	<b>0.109</b>	<b>0.225</b>	<b>53.1163844</b>
<b>Opción 2</b>	<b>INL:GLU</b>	<b>INL</b>	<b>GLU</b>	<b>-10.80841</b>	<b>2.128</b>	<b>12.93641</b>	<b>-0.103</b>	<b>0.169</b>	<b>0.272</b>	<b>47.5603309</b>

La raya punteada superior nos indica la interacción de INL. La línea punteada de abajo nos indica la interacción de GLU. El punto rojo muestra la interacción oxidante de la INL y el punto azul la interacción antioxidante da la INL.

La zona del fondo, hace referencia de la zona de mayor energía potencial y probabilidad que ocurra una interacción, en otras palabras, mayor afinidad. La zona de en medio se refiere a una afinidad media y la zona de arriba nos indica afinidad muy baja.



Para este caso, se observan los dos puntos en la zona media (moderada) pero; el punto rojo se ubica más abajo que el punto azul. Este fenómeno, aunque sea de acción moderada, nos indica que la GLU oxida a la INL.

**Figura 4.** Fondo de los pozos cuánticos interacción INL vs GLU. REDOX



Buscando mayor claridad en este fenómeno de oxidación de la GLU a la INL (punto rojo), hicimos un análisis de las vibraciones de cada enlace molecular para poder decir asegurar qué interacción o enlace molecular es el más viable.

En la figura 5 se presentan las curvas paramétricas de Morse. Las longitudes de los resortes cuánticos o CTE fueron tomadas de la tabla 2. En esta gráfica se enfatiza que la curva de la interacción GLU:INL es la más profunda (enlace más energético potencial) de todas.

Dentro del marco vibracional propuesto por la función de Morse, la rigidez de un enlace químico se cuantifica mediante la constante de fuerza, un parámetro que expresa su capacidad para resistir deformaciones mecánicas. Un valor elevado de esta constante implica que se requiere mayor energía para modificar la longitud del enlace, lo cual se manifiesta en una frecuencia vibracional más alta del sistema molecular.

Cada interacción muestra:

Su valor de ( $r_e$ ) convertido a  $\text{Å}$ ngstroms, el parámetro ( $a$ ) estimado para comparar rigidez del enlace La energía de disociación ( $D_e$ ) usada como referencia común, leyendas codificadas por color, la

ecuación de Morse destacada para facilitar análisis teórico.

Interpretación:

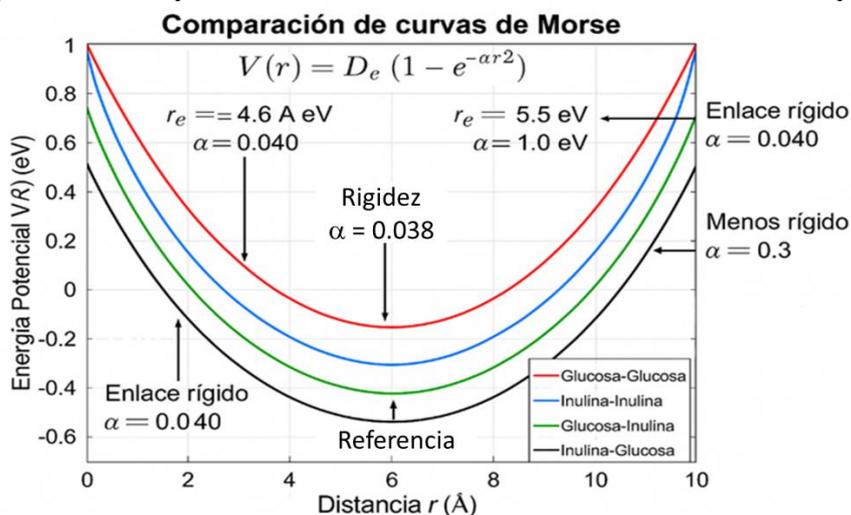
- Cada curva muestra cómo varía la energía potencial cuando la distancia entre las moléculas cambia.
- El mínimo de la curva representa el estado de equilibrio: allí el enlace es más estable.
- Curvas más estrechas indican enlaces más rígidos (mayor constante de fuerza).
- Curvas más profundas reflejan interacciones más fuertes (requieren más energía para romperse).

En un sistema individual no hay  $V < 0$ , pero en las curvas paramétricas si se pueden comparar ( $V < 0$ ).

En este caso la curva de la interacción “INL-GLU”, el punto de inflexión llega hasta -5.5 eV. Esto quiere decir que relativamente la interacción Insulina-GLU es la más estable de todas.

En otras palabras, dentro de los estados estables de cada par de interacciones (4 en este caso) el INL-GLU es el más estable de los estables.

**Figura 5.** Curvas paramétricas vibracionales de enlace molecular de cada par.



## CONCLUSIONES

### Objetivos

Analizar las interacciones entre INL, GLU y microbiota intestinal: con un enfoque desde la química cuántica aplicada.

### Hipótesis



La INL oxida o reduce a los AAs del cuerpo humano.

La GLU en exceso oxida a la INL, provocando un bloqueo que afecta a la microbiota intestinal.

### **Tesis**

La INL es un agente mayormente oxidante de los AAs del cuerpo humano. Figura 3 y tabla 2. Es poco antioxidante.

Si, la GLU en exceso oxida a la INL. Tabla 2, figuras 4 y 5.

### **Corolarios. Hallazgos no enunciados en el objetivo y las hipótesis**

Como sustancias puras, sin interaccionar; La INL presenta mucha energía cinética y poca afinidad con los AAs del cuerpo humano. Figura 1.

La función de Morse nos indica que por energía potencial, la interacción INL:GLU es la más estable.

Con este fenómeno se demuestra que la GLU si oxida a la INL, cuando está en exceso. De esta manera causa problemas en la microbiota intestinal.

### **REFERENCIAS BIBLIOGRÁFICAS**

Ahmed W, Rashid S. Functional and therapeutic potential of inulin: A comprehensive review. *Crit Rev Food Sci Nutr.* 2019;59(1):1-13. doi: 10.1080/10408398.2017.1355775. Epub 2017 Oct 11. PMID: 28799777.

Alonso-Allende J, Milagro FI, Aranaz P. Health Effects and Mechanisms of Inulin Action in Human Metabolism. *Nutrients.* 2024 Sep 2;16(17):2935. doi: 10.3390/nu16172935. PMID: 39275251; PMCID: PMC11397174.

Aparicio-Razo, M., Sánchez-Parada, O., Vázquez-López, E., García-Mar, J. J., Herrera-Cantú, I., García-Aguilar, K., ... & González-Pérez, M. (2017). Analysis of the molecular interaction of levodopa vs. amino acid using quantum method. *World Journal of Pharmaceutical Research,* 6(16), 115-121. 10.20959/wjpr201716-10271.

Birkeland E, Gharagozlian S, Birkeland KI, Valeur J, Måge I, Rud I, Aas AM. Prebiotic effect of inulin-type fructans on faecal microbiota and short-chain fatty acids in type 2 diabetes: a randomised controlled trial. *Eur J Nutr.* 2020 Oct;59(7):3325-3338. doi: 10.1007/s00394-020-02282-5. Epub 2020 May 21. Erratum in: *Eur J Nutr.* 2020 Oct;59(7):3339-3340. doi: 10.1007/s00394-020-02314-0. PMID: 32440730; PMCID: PMC7501097.



- González-Pérez, M. (2017). Quantum modeling to determine the carcinogenic potential of aflatoxin B1 produced by *Aspegillus* sp and its metabolic derivate aflatoxin M1. *Mexican Journal of Biotechnology*, 2(2), 255-270.
- González-Pérez, M. (2017). Quantum Theory of the Electron Transfer Coefficient. *International Journal of Advanced Engineering, Management and Science*, 3(10), 239932.
- Hughes RL, Alvarado DA, Swanson KS, Holscher HD. The Prebiotic Potential of Inulin-Type Fructans: A Systematic Review. *Adv Nutr*. 2022 Mar;13(2):492-529. doi: 10.1093/advances/nmab119. Epub 2023 Feb 10. PMID: 34555168; PMCID: PMC8970830.
- Kelly G. Inulin-type prebiotics--a review: part 1. *Altern Med Rev*. 2008 Dec;13(4):315-29. PMID: 19152479.
- Le Bastard Q, Chapelet G, Javaudin F, Lepelletier D, Batard E, Montassier E. The effects of inulin on gut microbial composition: a systematic review of evidence from human studies. *Eur J Clin Microbiol Infect Dis*. 2020 Mar;39(3):403-413. doi: 10.1007/s10096-019-03721-w. Epub 2019 Nov 9. PMID: 31707507.
- Liu F, Prabhakar M, Ju J, Long H, Zhou HW. Effect of inulin-type fructans on blood lipid profile and glucose level: a systematic review and meta-analysis of randomized controlled trials. *Eur J Clin Nutr*. 2017 Jan;71(1):9-20. doi: 10.1038/ejcn.2016.156. Epub 2016 Sep 14. PMID: 27623982.
- Madrigal, Lorena, & Sangronis, Elba. (2007). La inulina y derivados como ingredientes claves en alimentos funcionales. *Archivos Latinoamericanos de Nutrición*, 57(4), 387-396. Recuperado en 18 de junio de 2025, de [http://ve.scielo.org/scielo.php?script=sci\\_arttext&pid=S0004-06222007000400012&lng=es&tlng=es](http://ve.scielo.org/scielo.php?script=sci_arttext&pid=S0004-06222007000400012&lng=es&tlng=es)
- Qin YQ, Wang LY, Yang XY, Xu YJ, Fan G, Fan YG, Ren JN, An Q, Li X. Inulin: properties and health benefits. *Food Funct*. 2023 Apr 3;14(7):2948-2968. doi: 10.1039/d2fo01096h. PMID: 36876591.
- Reis SA, Conceição LL, Rosa DD, Dias MM, Peluzio Mdo C. Mechanisms used by inulin-type fructans to improve the lipid profile. *Nutr Hosp*. 2014 Jan 1;31(2):528-34. doi: 10.3305/nh.2015.31.2.7706. PMID: 25617533.



- Sánchez-Parada, O., Aparicio-Razo, M., Vázquez-López E., García-Mar, JJ., Herrera-Cantú, I., García-Aguilar, K., Pedarza-Gress, E., Flores-González, LA., González-Pérez. M. (2017). Analysis of the effect of levodopa on nitrogenous bases using quantum method. *World Journal of Pharmaceutical Research*, 6(17), 92-100. DOI: 10.20959/wjpr201717-10430.
- Sheng W, Ji G, Zhang L. Immunomodulatory effects of inulin and its intestinal metabolites. *Front Immunol*. 2023 Aug 10;14:1224092. doi: 10.3389/fimmu.2023.1224092. PMID: 37638034; PMCID: PMC10449545.
- Shoaib M, Shehzad A, Omar M, Rakha A, Raza H, Sharif HR, Shakeel A, Ansari A, Niazi S. Inulin: Properties, health benefits and food applications. *Carbohydr Polym*. 2016 Aug 20;147:444-454. doi: 10.1016/j.carbpol.2016.04.020. Epub 2016 Apr 8. PMID: 27178951.
- Sokić ZB, Knezević J, Vrvić MM. [Inulin--potential prebiotic]. *Med Pregl*. 2009 Mar-Apr;62(3-4):153-6. Serbian. doi: 10.2298/mpns0904153s. PMID: 19623846.

