



DOI: 10.26820/reciamuc/6.(3).julio.2022.387-398

URL: <https://reciamuc.com/index.php/RECIAMUC/article/view/920>

EDITORIAL: Saberes del Conocimiento

REVISTA: RECIAMUC

ISSN: 2588-0748

TIPO DE INVESTIGACIÓN: Artículo de revisión

CÓDIGO UNESCO: 23 Química

PAGINAS: 387-398







Antioxidantes y química computacional

Antioxidants and computational chemistry

Antioxidantes e química computacional

**Jorge Ricardo Campoverde Mori¹; William Johnny Jiménez Jiménez²;
José Alberto Zamora Guevara³; Walter Enrique Mariscal Santi⁴**

RECIBIDO: 20/06/2022 **ACEPTADO:** 10/07/2022 **PUBLICADO:** 26/08/2022

1. Master Universitario en Tecnología Educativa y Competencias Digitales; Master en Tecnologías de la Información y de la Comunicación Aplicadas a la Educación; Licenciado en Ciencias de la Educación Especialización: Informática; Universidad de Guayaquil; Guayaquil, Ecuador; campoverdemj@ug.edu.ec;  <https://orcid.org/0000-0002-2639-8040>
2. Magister en Epidemiología; Químico y Farmacéutico; Doctor en Bioquímica y Farmacia; Universidad de Guayaquil; Guayaquil, Ecuador; william.jimenezj@ug.edu.ec;  <https://orcid.org/0000-0001-6302-5481>
3. Magister en Procesamiento y Conservación de Alimentos; Químico y Farmacéutico; Universidad de Guayaquil; Guayaquil, Ecuador; jose.zamoragu@ug.edu.ec;  <https://orcid.org/0000-0002-4138-742X>
4. Diplomado en Docencia Superior; Magister en Diseño Curricular; Abogado de los Tribunales y Juzgados de la Republica del Ecuador; Licenciado en Ciencias Sociales y Políticas; Químico y Farmacéutico; Universidad de Guayaquil; Guayaquil, Ecuador; walter.mariscals@ug.edu.ec;  <https://orcid.org/0000-0003-4735-268X>

CORRESPONDENCIA

Jorge Ricardo Campoverde Mori

campoverdemj@ug.edu.ec

Guayaquil, Ecuador

RESUMEN

Los antioxidantes, son compuestos químicos que, a bajas concentraciones, previenen el daño oxidativo provocado a biomoléculas. La química computacional o teórica, generalmente se concibe dentro de un amplio rango que involucra áreas que van desde las aproximaciones clásicas como la mecánica molecular, pasando por métodos híbridos como Mecánica Cuántica/Mecánica Molecular, la mecánica cuántica, métodos relativistas y multi configuracionales para la astroquímica, y otras. El interés por desarrollar el presente estudio responde a querer profundizar los conocimientos en torno a los antioxidantes y la química computacional, por ello, el objetivo es efectuar una revisión bibliográfica a fines de enfatizar sobre algunos aspectos generales de los antioxidantes, como también en la química computacional como subrama científica y algunas referencias a estudios donde ésta se ha aplicado. Los resultados obtenidos alcanzaron a satisfacer el objetivo propuesto. En definitiva, la química computacional permite hacer la identificación de nuevos compuestos con la capacidad de actuar como antioxidantes, a través de una gran variedad de mecanismos, para prevenir y combatir los procesos degenerativos causados por el estrés oxidativo, y todo ello a unos costos moderados y de forma confiable.

Palabras clave: Metabolismo, Biomoléculas, Estrés Oxidativo, Radicales Libres, Modelado Molecular.

ABSTRACT

Antioxidants are chemical compounds that, at low concentrations, prevent oxidative damage caused to biomolecules. Computational or theoretical chemistry is generally conceived within a wide range that involves areas ranging from classical approaches such as molecular mechanics, through hybrid methods such as Quantum Mechanics/Molecular Mechanics, quantum mechanics, relativistic and multi-configurational methods for astrochemistry, and others. The interest in developing the present study responds to wanting to deepen the knowledge about antioxidants and computational chemistry, therefore, the objective is to carry out a bibliographic review in order to emphasize some general aspects of antioxidants, as well as in the chemistry computational science as a scientific sub-branch and some references to studies where it has been applied. The results obtained were able to satisfy the proposed objective. In short, computational chemistry allows the identification of new compounds with the ability to act as antioxidants, through a wide variety of mechanisms, to prevent and combat degenerative processes caused by oxidative stress, and all this at moderate costs. and reliably.

Keywords: Metabolism, Biomolecules, Oxidative Stress, Free Radicals, Molecular Modeling.

RESUMO

Os antioxidantes são compostos químicos que, em baixas concentrações, evitam os danos oxidativos causados às biomoléculas. A química computacional ou teórica é geralmente concebida dentro de uma vasta gama que envolve áreas que vão desde abordagens clássicas como a mecânica molecular, passando por métodos híbridos como a Mecânica Quântica/Mecânica Molecular, mecânica quântica, métodos relativistas e multi-configuracionais para astroquímica, e outros. O interesse em desenvolver o presente estudo responde ao desejo de aprofundar o conhecimento sobre antioxidantes e química computacional, portanto, o objectivo é realizar uma revisão bibliográfica a fim de enfatizar alguns aspectos gerais dos antioxidantes, bem como na ciência computacional da química como sub ramo científico e algumas referências a estudos onde tenha sido aplicada. Os resultados obtidos foram capazes de satisfazer o objectivo proposto. Em suma, a química computacional permite a identificação de novos compostos com a capacidade de actuar como antioxidantes, através de uma grande variedade de mecanismos, para prevenir e combater processos degenerativos causados pelo stress oxidativo, e tudo isto a custos moderados e fidedignos.

Palavras-chave: Metabolismo, Biomoléculas, Stress Oxidativo, Radicais Livres, Modelação Molecular.

Introducción

En todos los organismos vivos, durante su continuo proceso de metabolismo fisiológico, estará en la búsqueda mecanismos que conserven el equilibrio interno de las reacciones de oxidación, ocasionadas intencionalmente o como derivado de otro producto, es decir, como subproducto. Para ello se vale de distintos tipos de compuestos, sistemas químicos y enzimáticos que favorecen la disminución de dichas reacciones, reparan los daños generados por moléculas oxidantes y/o estabilizar los productos reactivos formados durante un proceso oxidativo. (Guillén, 2014)

Los antioxidantes, según éste mismo, son compuestos químicos que, a bajas concentraciones, previenen el daño oxidativo provocado a biomoléculas por parte de las Especies Reactivas del Oxígeno (ROS, según las siglas inglesas de reactive oxygen species) y Especies Reactivas de Nitrógeno (RNS, en inglés, acrónimo de Reactive Nitrogen Species), tales como: proteínas, ácidos nucleicos, ácidos grasos poliinsaturados, azúcares, entre otros.

En 2018, Perez, como experta afirmaba que, si bien era cierto que en recientes estudios el objetivo perseguido era el diseño de antioxidantes multifuncionales con la capacidad de evitar la formación o directamente detener los radicales libres, no es menos cierto que llevar a cabo esa clase de ensayo de manera experimental implicaba tiempo, uso de un gran número de reactivos y la generación de desechos químicos. (Perez, citada por Rodríguez, 2018)

“Las computadoras ayudan a estudiar procesos relacionados con esta área, como las propiedades de muchos compuestos sin tener que trabajar con ellos en el laboratorio”. (Barrera & De la Paz, 2018)

Desde la aparición de las computadoras con sus sistemas informáticos ha revolucionado el campo de la investigación en las diferentes áreas científicas, al conseguir

extraer información por medio de modelos matemáticos basados en las propiedades químicas de los diferentes compuestos que permiten predecir las diferentes reacciones que pueden darse. (Galano, 2017)

Más recientemente y en este mismo sentido, se ha encontrado el criterio de Gómez (2020), quien ha asegurado que la química teórica o computacional, comúnmente se contempla dentro de un espectro que involucra áreas que van desde las aproximaciones clásicas como la mecánica molecular, pasando por métodos híbridos como Mecánica Cuántica/Mecánica Molecular (QMMM), la mecánica cuántica, métodos relativistas y multi configuracionales para la astroquímica, hasta otras más. Todos estos espacios de desarrollo han sido intensificados tanto por el incremento de nuevas teorías y aproximaciones como por el incremento en el poder de cálculo (gracias al o desarrollo de la tecnología en el área de la computación), que todavía se ejecutan en diversos campos, y a su vez facilitan la aplicación de métodos teóricos y computacionales a sistemas cada vez más grandes, cuando consideramos el número de partículas o átomos involucrados o en el número de funciones base y métodos utilizados.

Según Choque, Gemio, & Nogales (2017), el origen de la Química Computacional (QC), históricamente se ha venido dando a raíz del avance en Química Teórica, a fines de examinar el comportamiento de la materia a nivel molecular mediante computadores, por ende, se puede decir que esta subrama es sinónimo de modelización molecular. De manera sucinta, la QC favorece en la ejecución y utilidad de diversas técnicas para la investigación de múltiples propiedades y comportamientos moleculares, tales como:

- La geometría molecular en un sentido amplio, además de distancias y ángulos de enlace, es posible caracterizar la forma y tamaños relativos de todo tipo de moléculas y macromoléculas.

- La energía de todo tipo de especies químicas, incluyendo intermedios, estados de transición, estados excitados, etc. Es posible, además, estimar distintos tipos de magnitudes termodinámicas tanto en fase gas como en fases condensadas.
- La reactividad química de una especie es un ejemplo de propiedad genuinamente química que puede cuantificarse en forma de índices de reactividad con la ayuda de la QC. (Choque, Gemio, & Nogales, 2017, págs. 41-42)

El interés que ha impulsado realizar el presente estudio parte de las ideas antes expuestas, por ello, el objetivo es resumir una exposición respecto a los antioxidantes y la QC, haciendo énfasis en definiciones, orígenes, clasificación de los antioxidantes, así como también en la QC como subrama científica y algunas referencias a estudios donde se ha aplicado la QC.

Materiales y Métodos

El diseño y la metodología investigativa aplicada corresponde al de un estudio bibliográfico y de revisión, respectivamente, ya que el objetivo se centra en consultar, recopilar, organizar, analizar e interpretar información y datos existentes en contenidos de carácter científico académico, sustentados en fuentes primarias, secundarias y terciarias.

En atención al objetivo antes señalado, se inicia el estudio efectuando algunas exploraciones mediante el uso de expresiones constituidas mediante el uso y alternabilidad de términos claves y operadores booleanos (o lógicos), en bases de datos y buscadores especializados, tales como: Redib, SciELO y Base, obteniendo los mejores resultados preliminares con: Antioxidante* AND química computacional; “química computacional”; y, química computacional +antioxidantes.

El referido proceso inicialmente consistió en la distinción de contenidos bibliográficos de

diversos tipos que guardaran la mayor relación posible con el tema objeto de estudio. Luego, según la disponibilidad en cada plataformas de registro de datos e inspección, se consideran otras variables de filtrado de información, básicamente las relacionadas con: periodo de publicación (últimos 10 años); disponibilidad (contenidos completos); idioma (español); acceso (abierto); clases de material bibliográfico (e-books, artículos originales, boletines informativos, ensayos, estudios científicos, síntesis investigativas, tesis de grado, posgrado o doctorado, notas informativas, publicaciones de noticias, otros), los cuales estuviesen sustentados en fuentes verificables.

Se desestimaron: los contenidos repetidos (duplicados), anotaciones académicas y otros tipos de materiales bibliográficos de escaso valor científico o con bajo nivel de evidencia.

Finalmente, el equipo procede con la lectura crítica y análisis interpretativo de todos los contenidos bibliográficos definitivamente recabados como evidencia, para así posteriormente generar toda la argumentación y contenida en el primer, tercer y último apartado de la presente entrega, absolutamente consistente con criterio consensuado de los investigadores participantes.

Resultados

Antioxidantes. Generalidades

Un antioxidante es una molécula capaz de prevenir o reducir el estrés oxidativo. Puede actuar de dos maneras distintas: inhibiendo directamente la acción de los radicales libres, denominados antioxidantes primarios, o reparando el daño producido en tejidos afectados, denominados antioxidantes secundarios. Un antioxidante debe tener la capacidad de efectuar reacciones de terminación o inactivación de radicales libres, convirtiéndose en especies menos reactivas y más estables. (Manrique, 2018, pág. 7)

Estas sustancias pueden considerarse como blancos sacrificables en beneficio de la protección de moléculas de alta importancia biológica como son las membranas celulares, las proteínas, el ADN, etc. La clave para que un compuesto químico funcione como un buen antioxidante es que su reactividad química hacia los radicales libres sea mayor que a la de las especies que se quiere proteger y, que sean capaces de terminar la reacción en cadena que provocan los radicales libres. De no ser posible esto último, al menos las reacciones de los antioxidantes con los radicales libres presentes en el entorno biológico deberán dar lugar a radicales de baja reactividad y por tanto menos dañinos que los que se forman naturalmente en los organismos vivos. (Galano, 2017)

Perea (2014), apoyándose en sus fuentes refiere que un antioxidante es el extracto natural o sintético que, en pequeñas proporciones, interviene en el retraso o la prevención del proceso oxidativo de biomoléculas más vulnerables, tales como: ácidos grasos, proteínas y ácidos nucleicos.

Clasificación de los antioxidantes

Básicamente, dependiendo de la fuente de donde provengan, los antioxidantes pueden ser endógenos o exógenos. (Galano, 2017; Manrique, 2018)

Antioxidantes endógenos. Son los generados constantemente por el organismo humano como instrumento de protección, neutralizan la producción habitual de radicales libres en los procesos metabólicos. (Manrique, 2018) “Algunos antioxidantes endógenos son enzimas, como por ejemplo la superóxido dismutasa, pero también los hay no-enzimáticos (antioxidantes químicos) como la melatonina, el glutatión, la coenzima Q10 y los ácidos lipoicos.” (Galano, 2017, pág. 23)

Antioxidantes exógenos. Pueden ser y se subdividen según su origen: naturales o sintéticos.

Antioxidantes exógenos naturales. Proviene de plantas, verduras y frutas, y entre éstos se tienen a: los polifenoles (presentes en las uvas y cacao); los carotenos (contenidos en frutos y vegetales de colores intensos como las zanahorias, el tomate y demás frutos rojos); los ácidos fenólicos (hallados en el té y el café); el tirosol y el hidroxitirosol (propios en el aceite de oliva), el ácido ascórbico o vitamina C (extraíble en los cítricos); la vitamina E (obtenible del brócoli) y otros más. (Galano, 2017; Manrique, 2018)

Antioxidantes exógenos sintéticos. Algunos ejemplos de antioxidantes sintéticos son los galatos, la N-acetilcisteína y su amida, el Edaravone (y sus derivados), el hidroxianisol butilado, el hidroxitolueno butilado y la etoxiquina. (Galano, 2017)

Precisamente sobre los antioxidantes sintéticos, Manrique (2018) refiere en base a sus fuentes que, resultan ser de escaso interés ya que a ellos se recurren como estándares de medición para comparar con los antioxidantes naturales; se añaden a los alimentos procesados para evitar su oxidación.

Otra clasificación aportada en el estudio de Galano (2017), es la que antioxidantes dependiendo de cómo actúan químicamente en:

Antioxidantes primarios o tipo I. Éstos previenen la oxidación por reacción directa con los radicales libres produciendo especies significativamente menos reactivas o terminando la reacción en cadena. Son conocidos en inglés como “free radical scavengers”, o sea “atrapadores de radicales libres”.

Antioxidantes secundarios o tipo II. Retardan la oxidación por vías de acciones indirectas incluyendo quelación de metales, reparación de antioxidantes primarios donándoles átomos de H o electrones, descomposición de H₂O₂ en especies no radicalarias, absorción de luz ultravioleta, etcétera. (pág. 23)

Esta tratadista también refiere que, se han propuesto las características idóneas que han de poseer los antioxidantes, éstas incluyen:

- Debe ser versátil, o sea ser capaz de reaccionar eficientemente con una amplia gama de radicales libres o actuar como antioxidante primario y secundario.
- Debe ser capaz de cruzar las barreras biológicas y de transportarse rápidamente a las células.
- Debe estar disponible, por lo que es necesario que sea consumido en la dieta, como suplementario alimentario o producido endógenamente.
- Debe estar ampliamente distribuido en el organismo y presente en cantidades suficientemente altas.
- No debe ser susceptible de grandes pérdidas urinarias.
- Deben ser viables para regeneración (puede ser regenerado por otro antioxidante, que reaccione con 2 radicales libres, o que sus metabolitos también tengan actividad antioxidante).
- No puede ser tóxico ni antes ni después de reaccionar con los radicales libres.
- Debe terminar la cadena de reacción radicalaria o formar productos de reacción mucho menos reactivos que los radicales iniciales.
- Además, debe reaccionar rápidamente. Este es un punto crucial, ya que, en general, los antioxidantes se encuentran presentes en menores cantidades que las moléculas biológicas a proteger. Así que la única manera en que esta protección puede ser eficiente es si los antioxidantes reaccionan más rápido que dichas moléculas. (Galano, 2017, pág. 24)

La Química Computacional

Según Mejía (2021), la Unión Internacional de Química Pura y Aplicada (IUPAC, por sus siglas en inglés) define la QC como “una disciplina que utiliza métodos matemáticos para el cálculo de propiedades moleculares o para la simulación del comportamiento molecular.”

De la misma manera, es importante tener claro que la QC es aplicable a diversas áreas como la bioquímica, ciencia de materiales, nanotecnología y biología molecular. (Cuesta & Meneses, 2020)

Arteaga (2018) sostiene que el surgimiento de la QC derivó del adelanto de “softwares basados en modelos matemáticos que describen las propiedades químicas a distintos niveles, buscando obtener información para desarrollar nuevos experimentos.” (pág. 12) También refiere que, como herramienta de la química teórica, ha facilitado y mejorado la sintetización de los datos y el descubrimiento de nueva información, mediante el perfeccionamiento de los modelos matemáticos diseñados en base a las propiedades químicas de las moléculas que componen la materia analizada; y por consiguiente, logrando dilucidar lo evidenciado en las atapas de experimentación de las diferentes observaciones o revelando las conclusiones de acuerdo a las diferentes hipótesis mediante modelos químicos matemáticos generados por dichos softwares e traducidos por expertos en el área.

Adicionalmente ilustra que la utilidad de esta rama de la química puede ser tanto a nivel teórico como experimental, dado que aplica conforme a la materia y el tipo de estudio que se esté efectuando. En cuanto a la complejidad agregó que, bien podría ser alta o baja, conforme a los objetivos del estudio y la observación de las propiedades químicas moleculares para obtener la predicción del comportamiento de las diferentes reacciones.

La modelización basada en las propiedades químicas y moleculares para el cálculo o predicción de dichas reacciones o la simulación de sistemas como los biomoleculares, el diseño de fármacos, alimentos, polímeros, moléculas tanto inorgánicas como orgánicas, han dado sus aportes de información para el desarrollo de las ciencias, estos conocimientos son validados y llevados al campo industrial para la optimización y elaboración de nuevos productos. (Hofmann & Schaefer; como se cita en Artega, 2018, pág. 6).

Otro destacado aspecto ha sido mencionado en el aporte de Choque, Gemio, & Nogales (2017), al referir que:

Además, la QC es capaz de determinar la geometría y estabilidad relativa de intermedios y estados de transición de reacción, es decir, caracteriza los mecanismos de reacción. Más aún dispone de herramientas sofisticadas para el cálculo de todo tipo de magnitudes cinéticas como constantes de velocidad, efectos cinéticos isotópicos, secciones eficaces de reacción, factores de efecto túnel, etc. (Sánchez, como se cita en Choque, Gemio, & Nogales, 2017, pág. 42)

Por otra parte, Galano (2017) precisó que la QC, derivada de la química, comprende la utilización de software para el análisis de sistemas químicos, de los cuales se obtienen resultados generalmente fiables, toda vez que la metodología aplicada sea la apropiada en cada conjunto en particular sometido a estudio.

Esta rama de la ciencia permite estimar la capacidad antioxidante de los compuestos químicos, tanto de forma absoluta como relativa. Es posible además establecer relaciones estructura actividad para identificar dentro de una serie de antioxidantes cuál tendrá la mayor actividad, así como predecir transformaciones estructurales que puedan conllevar a la obtención de compuestos con mayor capacidad antioxidante. También permite identificar los mecanismos

de acción más probables. (Galano, 2017, pág. 24)

Aunque Cuesta & Meneses (2020) coinciden con varias de las afirmaciones expuestas por los anteriores autores, también puntualizan que con los métodos de QC es posible calcular geometrías moleculares, tasas y equilibrios, espectros, modelos de relación cuantitativa estructura-actividad (QSAR por sus siglas en inglés) y otras propiedades físicas de interés.

Coincidentemente, en Galano (2017), se ha encontrado una breve explicación sobre el método QM-ORSA (siglas que en inglés resumen: Quantum mechanics-based test for overall free radical scavenging activity). Según éste, se trata de un protocolo computacional desarrollado para el estudio de antioxidantes tipo I, el cual:

- Tiene en cuenta la polaridad del medio y el pH en disolución acuosa, y permite una cuantificación doble y separada de la actividad antioxidante primaria, o sea en medio polar (agua) y nopolar (lípidos).
- Consta de dos escalas diferentes de cuantificación: absoluta (basada en constantes de velocidad globales o aparentes) y una relativa (vs. Trolox, que es un antioxidante de referencia frecuentemente usado en estudios experimentales).
- Permite establecer tendencias en la capacidad antioxidante primaria relativa de compuestos diversos e identificar los antioxidantes primarios con mayor actividad.
- Ha sido ampliamente validada contra datos experimentales. (Galano, 2017, pág. 25)

En este mismo orden de ideas, Perea (2014), también fundadamente ha dado a entender que la QC se resume a técnicas matemáticas que, al ser correctamente desarrolladas, pueden emplearse en un programa o paquete de programas de computadora.

Esto, en sí, se deriva como subcampo de la Química Teórica, especialidad en donde las matemáticas se conjugan con los principios de la física para estudiar los procesos de interés químico; y de la Química, entendida como la ciencia que se encarga de la construcción, transformación y propiedades de las moléculas.

De este tratadista también se extrae lo relacionado con métodos de QC dado que, así como señala que la QC comprende el uso de un conjunto de métodos matemáticos (Tabla 1.) para investigar problemas químicos en una computadora, afirma que las interrogantes computacionalmente investigadas suelen ser, por lo general: a) geometría molecular, b) energías de moléculas o estados de transición, c) reactividad química, d) espectros IR, UV y RMN, e) interacción

sustrato-enzima; f) propiedades físicas; g) otras. Entonces, los estudios establecidos en estas preguntas disponen de una variedad de métodos que, fundamentalmente son agrupados en: 1) Métodos de Mecánica Molecular (MM) y 2) Métodos de Estructura Electrónica (EE).

Los métodos de MM se fundamentan en modelos simples de Mecánica Clásica, considerando a las moléculas como un conjunto de átomos de carga puntual que interactúan entre ellos a través de la Segunda Ley de Newton, la cual describe el comportamiento del sistema. En cambio, los métodos de EE se fundamentan en la Mecánica Cuántica (MC) y, principalmente, en la ecuación de Schrödinger, describiendo a las moléculas en términos de interacciones explícitas entre núcleos y electrones. (Perea, 2014, pág. 87)

Tabla 1. Comparación de los métodos de cálculo más utilizados en química computacional.

Método	Fundamento	Rango de Aplicación	Ventajas	Desventajas
Mecánica molecular	Potenciales de interacción, física clásica.	1-10 ⁵ átomos	Se requiere poca potencia del ordenador Gran rapidez, muy eficientes en fases condensadas. Se requiere poca potencia del ordenador Gran rapidez, muy eficientes en fases condensadas.	Aplicación delimitada por el potencial del cálculo seleccionado, requiere datos experimentales.
<i>Ab initio</i>	Ecuación de Shrodinger y función de onda, utiliza matemáticas rigurosas.	1-10 ² átomos	Exactitud y precisión controlable, no requiere parámetros experimentales.	Lentos, los métodos más avanzados son muy complicados de usar.
DFT	Teorema de Kohn Sham y densidad electrónica	1-10 ³ átomos	Más rápido que <i>ab initio</i> pero aplicación limitada	Exceso de métodos, No hay pautas para mejorar los resultados.
Semiempíricos	Ecuación de Shrodinger y función de onda o Teorema de Kohn Sham y densidad electrónica (utilizando forma de ajuste)	1-10 ⁴ átomos	Gran rapidez, fácil de usar, bastante fiable en moléculas orgánicas, utiliza aproximaciones	Errores no sistemáticos. Escasa fiabilidad en moléculas con metales y especies inestables, requiere datos experimentales.

Nota: tomado de "Métodos y Usos de la Química Computacional" de Valles, Rosales, Serrato, & Fariás (2014). *AQM – Acta Química Mexicana*. 6(11), p.19 (<http://www.actaquimicamexicana.uadec.mx/articulos/AQM11/11-3QuimicaComputacional.pdf>)

Aplicaciones

Se ha encontrado como ejemplo de aplicación de la QC, el estudio desarrollado por Adriana Pérez González titulado “Diseño computacional de antioxidantes de la feniletilamina con posible actividad como neuroprotectores en el tratamiento de Parkinson y Alzheimer”- Esta investigación se ha enfocado en el análisis, a nivel molecular, de la capacidad antioxidante de distintos compuestos obtenidos a partir de la modificación computacional de la feniletilamina; la cual tiene propiedades como neuroprotector y es de importancia biológica para la prevención y tratamiento de enfermedades neurodegenerativas, en síntesis, busca obtener a través del análisis computacional, compuestos con mejor actividad antioxidante que la feniletilamina, pero conservando sus propiedades como neuroprotector.

Tabla 2. Programas utilizados para química computacional.

Nombre del programa	Distribuidor	Funciones del programa
Asp TM	Oxford Molecular	Paquete del que se obtienen medidas cuantitativas de similaridad entre dos moléculas basándose en una serie de propiedades físicas. Diseña fármacos mediante comparación de propiedades
CHARMM	Harvard University	Mecánica y dinámica molecular para macromoléculas.
DelPhi	Columbia University	Soluciona la ecuación de Poisson-Boltzmann. Calcula energías de enlace de fármacos potenciales para su optimización.
DL POLY	Daresbury Laboratory	Paquete de simulación de dinámica molecular paralelo para sistemas iónicos y macromoléculas.
Fantom	University of Texas	Calcula conformaciones de polipéptidos y proteínas de baja energía con experimentos de RMN. Modelado molecular.
Gaussian	Gaussian, Inc.	Paquete de programas ab initio para cálculos de estructura electrónica molecular
GETAREA	University of Texas	Calcula el área superficial accesible en solventes y la energía de solvatación atómica para macromoléculas
Gromacs	University of Groningen	Dinámica molecular en Paralelo para proteínas, lípidos y ácidos nucleicos.
MOLDEN	CAOS/CAMM Center the Netherlands	Es un programa que despliega densidades moleculares calculadas desde paquetes Ab Initio como GAMMES-UK, GAMME-US, y GAUSSIAN, además de paquetes semi-empíricos como Mopac/Ampac.
MOLPRO	University of Birmingham	Paquete de programas ab initio para cálculos de estructura electrónica molecular
NAMD	Beckman Institute	Dinámica molecular de sistemas biológicos
Spartan	Wavefunction, Inc.	Modelado molecular: ab initio HF y MP2, funcionales de la densidad, semiempíricos

Nota: tomado de “Métodos y Usos de la Química Computacional” de Valles, Rosales, Serrato, & Farías (2014). *AQM-Acta Química Mexicana*. 6(11), p.19 (<http://www.actaquimicamexicana.uadec.mx/articulos/AQM11/11-3QuimicaComputacional.pdf>)

Hoy día, ya se registra un considerable número de investigaciones relacionadas con los antioxidantes y la química computacional, de hecho, otras referencias revisadas en este estudio y que bien pueden aportar evidencia de ello son:

- “Estudio computacional de la capacidad antioxidante de moléculas de interés biológico: el flavonoide C₂₁H₁₆O₆”, por Gutiérrez (2017).
- “Estudio computacional de la capacidad antioxidante de la serotonina” por Plaza (2018)
- “Estudio teórico de la capsaicina, su interacción con el receptor de potencial transitorio vaniloide 1 (TRPV1), y su posible modificación en pro de la actividad antioxidante” por Porras (2022).

Para finalizar con este apartado, es pertinente recordar y siempre estar claro en que, ninguno de estos casos de utilidad de la QC por los cálculos de ella obtenidos podrán reemplazar a los resultados evidenciables de los estudios experimentales, ya que éstos irrefutablemente sí recaban los datos y obtienen sus resultados de lo estudiado en la naturaleza; no obstante, la QC representa un complemento para entender más a profundidad eventos que son imposibles de visualizar experimentalmente. (Cuesta & Meneses, 2020)

Conclusión

Sobre la base de las fuentes y datos utilizados en este estudio es posible deducir que, los antioxidantes son sustancias compuestas de origen endógeno y exógeno que poseen la especial capacidad de equilibrar de las reacciones de oxidación que internamente ocurren en cualquier proceso fisiológico y metabólico de todos los organismos vivos.

Es incuestionable la creciente demanda de estudios en torno a los antioxidantes multifuncionales, y tal exigencia ha estado siendo influenciada, en cierta medida, por los

agigantados avances en el ámbito de la tecnología computacional e informática, la cual cada vez más ha ampliado su poder de cómputo.

No queda duda de que, efectivamente, ha sido a partir de la aparición de las super computadoras con sus innovadores sistemas informáticos lo que ha revolucionado el campo de la investigación en las diferentes áreas científicas, ya que gracias a ello es que se ha podido lograr extraer muchísima información mediante la aplicación de modelos matemáticos basados en las características químicas de los diferentes compuestos que permiten predecir las diferentes reacciones que pueden darse.

Finalmente, es posible indicar que aún puede muy pronto para medir la versatilidad que aporta la QC en el estudio de los antioxidantes, pues, constantemente se amplía y perfecciona su uso hacia nuevas aplicaciones científicas, lo que cada vez más va permitiendo dar respuestas a muchas inquietudes, que de modo experimental serían difíciles, y algunas veces, poco o nada alcanzables en el corto, mediano y hasta largo plazo.

La QC permite hacer la identificación de nuevos compuestos con la capacidad de actuar como antioxidantes, a través de una gran variedad de mecanismos, para prevenir y combatir los procesos degenerativos causados por el estrés oxidativo, y todo ello a unos costos moderados y de forma confiable. (Galano, 2017)

Bibliografía

- Arteaga, M. (2018). Determinación de la actividad antioxidante de los flavonoides mediante análisis QSAR. Universidad del Azuay, Escuela de Ingeniería en Alimentos. Cuenca: Universidad del Azuay. Recuperado el 01 de agosto de 2022, de <https://dspace.uazuay.edu.ec/bitstream/datos/8484/1/14202.pdf>
- Barrera, C., & De la Paz, N. (2018). Química computacional en tu vida. *Universitaria*, 1(5), 28-19. Recuperado el 01 de agosto de 2022, de <https://revistauniversitaria.uaemex.mx/article/view/10391>

- Choque, R., Gemio, R., & Nogales, J. (julio de 2017). Estudio de propiedades moleculares de cuatro flavonoides de *Baccharis boliviensis*. *CON-CIENCIA*, 5(1), 39-56. Recuperado el 01 de agosto de 2022, de http://www.scielo.org.bo/pdf/rcfb/v5n1/v5n1_a04.pdf
- Cuesta, S., & Meneses, L. (2020). La química computacional como herramienta para entender procesos químicos y bioquímicos a nivel molecular. *InfoANALÍTICA*, 8(2), 69-100. doi:<https://doi.org/10.26807/ia.vi.175>
- Galano, A. (septiembre-diciembre de 2017). Estrés oxidativo, radicales libres, antioxidantes y ¿Química Computacional? (M. Ortiz, & A. Rojas, Edits.) *Boletín de la Sociedad Química de México*, 11(3), 21-26. Recuperado el 01 de agosto de 2022, de http://bsqm.org.mx/pdf-boletines/V11/V11N3/BSMQ_11_3_kEstresOxidativo.pdf
- Gómez, B. (2020). Visión y Perspectivas de la Química Teórica o Computacional. *Revista de la Sociedad Química del Perú*, 86(3), 205. Recuperado el 01 de agosto de 2022, de <http://www.scielo.org.pe/pdf/rsqp/v86n3/2309-8740-rsqp-86-03-205.pdf>
- Guillén, R. (2014). Síntesis y estudio teórico-experimental de las propiedades y mecanismos de oxidación de nuevos ésteres tipo bis- y tris- derivados de ácido ferúlico. Universidad Veracruzana, Unidad de Servicios de Apoyo en Resolución Analítica. Xalapa: Universidad Veracruzana. Recuperado el 01 de agosto de 2022, de <https://148.226.24.32/bitstream/handle/123456789/46857/GuillenVillarRoberto.pdf?sequence=5>
- Gutiérrez, J. (2017). Estudio computacional de la capacidad antioxidante de moléculas de interés biológico: el flavonoide C₂₁H₁₆O₆. Universidad de Valladolid. Facultad de: Universidad de Valladolid. Recuperado el 01 de agosto de 2022, de <http://uvadoc.uva.es/handle/10324/25977>
- Manrique, M. (2018). Evaluación de la Capacidad Antioxidante de los Flavonoides Presentes en las Hojas de *Annona Muricata* (Guanábana) mediante Química Computacional. Universidad Católica de Santa María, Escuela Profesional de Ingeniería Biotecnológica. Arequipa: Universidad Católica de Santa María. Recuperado el 01 de agosto de 2022, de <http://tesis.ucsm.edu.pe/repositorio/handle/UCSM/7895>
- Mejía, S. (26 de mayo de 2021). Química computacional: es posible conseguir resultados desde casa. Recuperado el 01 de agosto de 2022, de *Química computacional: es posible conseguir resultados desde casa*
- Perea, L. (2014). Estudio teórico del mecanismo de oxidación de sistemas antioxidantes tipo bis-derivados de ácido cafeico y ácido ferúlico. Universidad Veracruzana, Unidad de Servicios de Apoyo de Resolución Analítica. Xalapa: Universidad Veracruzana. Recuperado el 01 de agosto de 2022, de https://node2.123dok.com/dt02pdf/123dok_es/000/873/873996.pdf.pdf?X-Amz-Content-Sha256=UNSIGNED-PAYLOAD&X-Amz-Algorithm=AWS4-HMAC-SHA256&X-Amz-Credential=aa5vJ7sqx6H8Hq4u%2F20220822%2F%2Fs3%2Faws4_request&X-Amz-Date=20220822T183600Z&X-Amz-SignedHeaders=ho
- Plaza, A. (2018). Estudio computacional de la capacidad antioxidante de la serotonina. Universidad de Valladolid, Facultad de Ciencias. Valladolid: Universidad de Valladolid. Recuperado el 01 de agosto de 2022, de <https://uvadoc.uva.es/bitstream/handle/10324/32081/TFG-G3025.pdf?sequence=2&isAllowed=y>
- Porrás, M. (2022). Estudio teórico de la capsaicina, su interacción con el receptor de potencial transitorio vaniloide 1 (TRPV1), y su posible modificación en pro de la actividad antioxidante. Toluca: Universidad Autónoma del Estado de México. Recuperado el 01 de agosto de 2022, de http://ri.uaemex.mx/bitstream/handle/20.500.11799/112573/Tesis_repositorio_Porrás.pdf?sequence=2&isAllowed=y
- Rodríguez, N. (12 de octubre de 2018). Química computacional para acelerar el estudio y diseño de antioxidantes. Recuperado el 01 de agosto de 2022, de <https://www.comunicacion.amc.edu.mx/comunicados/quimica-computacional-para-acelerar-el-estudio-y-diseno-de-antioxidantes>
- Valles, A., Rosales, L., Serrato, L., & Farías, L. (2014). Métodos y Usos de la Química Computacional. *Acta Química Mexicana - AQM*, 6(11), 16-21. Recuperado el 01 de agosto de 2022, de <http://www.actaquimicamexicana.uadec.mx/articulos/AQM11/11-3QuimicaComputacional.pdf>

CITAR ESTE ARTICULO:

Salazar Haro, J. E., Villacís Mora, D. A., Barriga Fonseca, F. J., & Yauripoma Lata, O. J. (2022). Actualización en técnicas quirúrgicas para desgarros irreparables del manguito rotador. RECIAMUC, 6(3), 375-386. [https://doi.org/10.26820/reciamuc/6.\(3\).julio.2022.375-386](https://doi.org/10.26820/reciamuc/6.(3).julio.2022.375-386)

