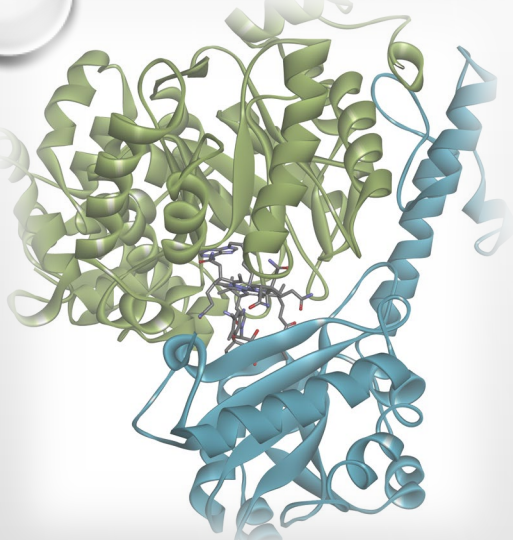


Química Teórica & Computacional

Entendiendo el Mecanismo de Transformaciones en Proteínas Clave en Salud, Enfermedad y Contaminación ambiental

ETANOLAMINA AMONIO LIASA BACTERIANA (EAL)



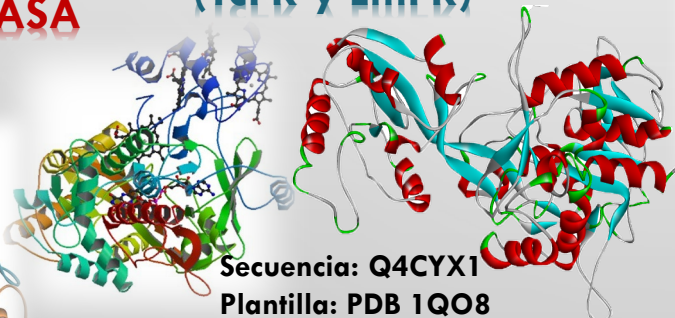
ALBUMINA SERICA HUMANA (HSA)



Transportadora de fármacos, ácidos grasos, etc.

¿Potencial antioxidante? (salud)
¿Efectos glicación? (diabetes)

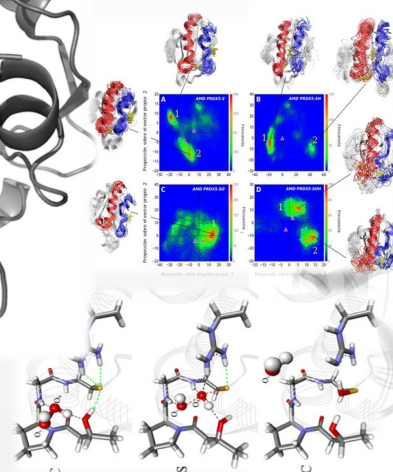
FUMARATO REDUCTASAS DE PARÁSITOS (NADH:FR) (TcFR y LmFR)



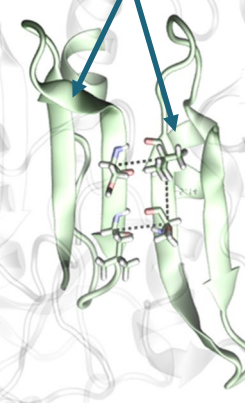
Blanco fármacos específicos Chagas y Leishmaniasis

PEROXIREDOXINAS HUMANAS (PRDX)

(PRDX5) monómero

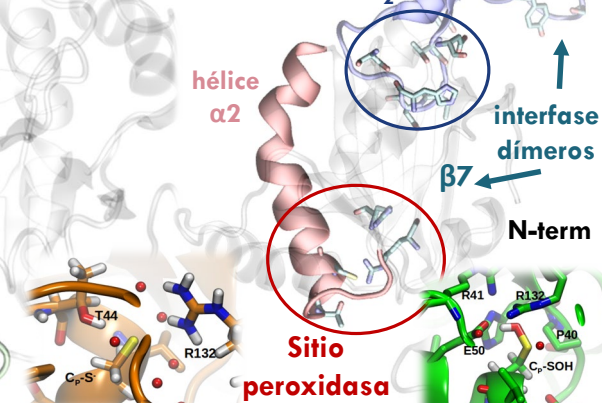


interfase hojas $\beta 7$



(PRDX6) homodímero tipo-B anti

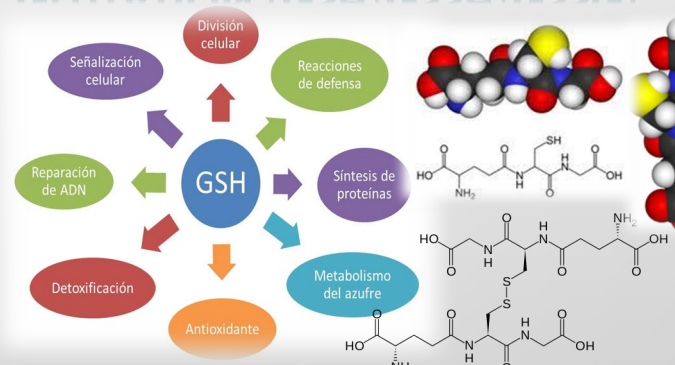
hélice $\alpha 2$



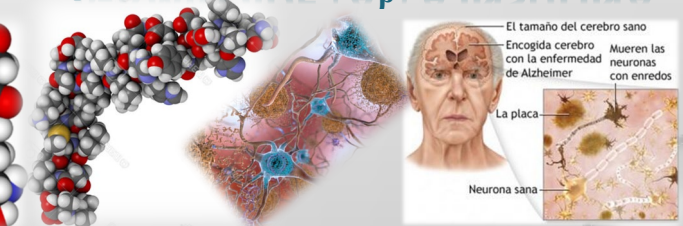
Enzimas clave en la defensa celular antioxidante: cáncer y diabetes

PEQUEÑAS PROTEÍNAS Y AMINOÁCIDOS

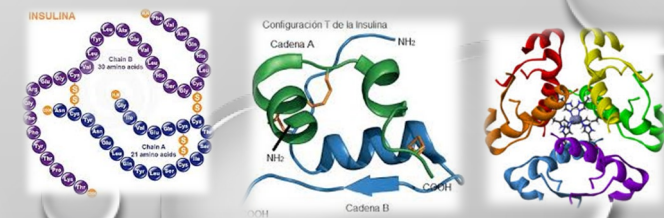
GLUTATIÓN (GSH/GSSH/GSSG)



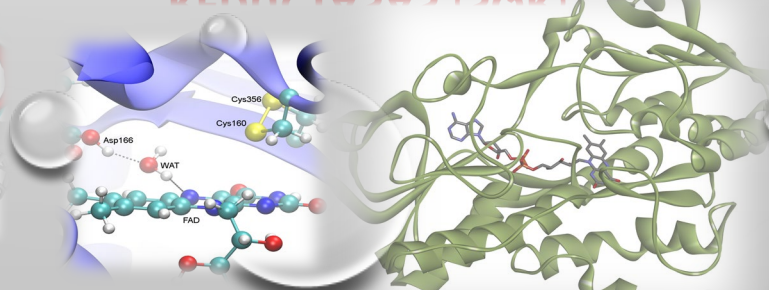
β -AMILOIDE (A β) e INSULINA



Vínculo Alzheimer-Diabetes-Glicación

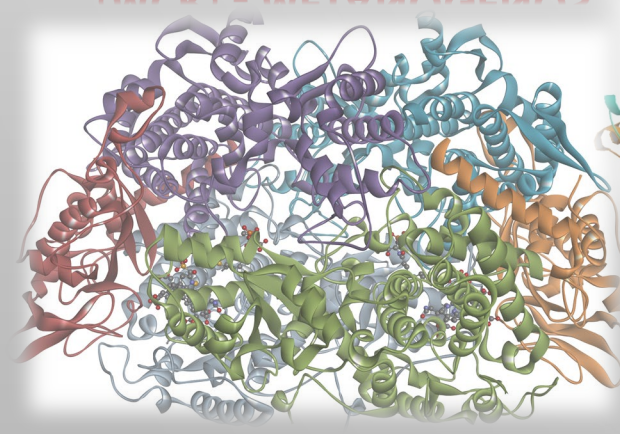


SULFURO:QUINONA OXIDO REDUCTASAS (SQR)



Oxida H₂S en bacterias y mamíferos, daños miocardio, ocular, neurodegenerativo

METILCOENZIMA M REDUCTASA (MCR) - METANÓGENOS



Producción de metano (contaminante atmosférico) en estómago (rumen) de ganado

Metabolismo anaerobio de N en bacterias entéricas patógenas (intoxicación alimentaria)