Integración de la caracterización experimental y el modelado molecular para el estudio de tres glutatión transferasas de Taenia solium, para el desarrollo de inhibidores

Ponciano García Gutiérrez Department of Chemistry, UAM-Iztapalapa Av. San Rafael Atlixco 186, Leyes de Reforma 1ra Sección, Iztapalapa, C.P. 09340, Mexico City, CdMx.

pgarcia@xanum.uam.mx

Las glutatión transferasas (GST) son una familia de enzimas multifuncionales presentes en procariontes y eucariontes, cuya principal actividad es catalizar la conjugación del tripéptido glutatión (GSH) con compuestos tóxicos endógenos y exógenos, para facilitar su excreción o posterior metabolismo.

Además, en el platelminto Taenia solium (T. solium), agente causal de la teniasis y cisticercosis en humanos, y de la cisticercosis en cerdos, las GST participan en la inmunomodulación, favoreciendo el establecimiento y la supervivencia del parásito en su hospedador, así como en el almacenamiento y/o transporte de compuestos no sustrato en el sitio denominado ligandina, entre otras funciones. En este parásito, la subfamilia de GST citosólicas (cGST) posiblemente constituya su principal sistema de desintoxicación [1].

Por ello, las cGST de T. solium se han propuesto como posibles dianas farmacológicas para combatir las enfermedades causadas por este parásito [2-4]. Se han identificado cuatro clases de cGST en T. solium, de acuerdo con la clasificación establecida para las GST de mamíferos [1]: la GST de clase α/μ, más abundante, con una masa molecular de 25.9 kDa, denominada Ts26GST; la GST de clase µ, menos abundante, con una masa molecular de 25.5 kDa, denominada Ts25GST; y la GST de clase σ, moderadamente abundante, de 24.3 kDa, denominada Ts24GST. Todas ellas son funcionales únicamente en su forma dimérica.

En esta plática presentaré los resultados obtenidos por nuestro grupo de investigación en torno a la caracterización bioquímica de las tres cGST de T. solium, así como la caracterización estructural, tanto experimental como computacional, de Ts26GST y Ts24GST, y el desarrollo de inhibidores dirigidos a las tres cGST, mediante enfoques también computacionales y experimentales [2-7].















References

- [1] Torres-Rivera, A.; Landa, A. Acta Trop. 105, 99e102 (2008).
- [2] García-Gutiérrez, P.; Zubillaga, R. A.; Téllez-Plancarte, A.; Flores-López, R.; Camarillo-Cadena, M.; Landa, A. *J. Mol. Graph. Model.*, **100**, 107707 (2020).
- [3] Miranda-Blancas, R.; Rodríguez-Lima, O; García-Gutiérrez, P.; Flores-López, R.; Jiménez, L.; Zubillaga, R. A.; Rudiño-Piñera, E.; Landa, A. *FEBS Open Bio.* **14**, 726-739 (2024).
- [4] Sánchez Pérez, L.; Zubillaga, R. A.; García-Gutiérrez, P.; Landa, A. *Trop. Med. Infect. Dis.*, **9**, 85. (2024).
- [5] Miranda-Blancas, R.; García-Gutiérrez, P.; Sánchez-Juárez, C.; Cardona-Echavarría, M. C.; Flores-López, R.; Zubillaga, R. A.; Rodríguez-Lima, O.; Sánchez-Pérez, L.; Rudiño-Piñera, E.; Landa, A. *PLoS Negl Trop Dis.*, **19**, e0013024 (2025).
- [6] Sánchez-Juárez, C.; Sánchez Pérez, L.; Zubillaga, R. A.; Flores-López, R.; Landa, A.; Jiménez, L.; Miranda-Blancas, R.; Rudiño-Piñera, E.; Cardona-Echavarría, M.; García-Gutiérrez, P. J. *Mex. Chem. Soc.*, **69**, 39-47 (2025).
- [7] Sánchez-Juárez, C.; Flores-López, R.; Sánchez Pérez, L.; García-Gutiérrez, P.; Jiménez, L.; Landa, A.; Zubillaga, R. A. Biomolecules, 2025, 15, 7 (2025).



El Dr. **Ponciano García Gutiérrez** es Licenciado en Química por la Facultad de Química de la UNAM y Doctor en Ciencias (Química) por la Universidad Autónoma Metropolitana, Unidad Iztapalapa. En esta última ha impartido diversos cursos en las licenciaturas en Química, Ingeniería Bioquímica Industrial, Biología Experimental e Hidrobiología, así como en el Posgrado en Ciencias (Química). Es integrante del Sistema Nacional de Investigadoras e Investigadores (SNII) y del Programa para el Desarrollo Profesional Docente (PRODEP).

Obtuvo la Medalla al Mérito Académico por sus estudios de doctorado y ha realizado estancias de investigación en el Centro Nacional de Biotecnología en España, la Facultad de Medicina y el Instituto de Química de la UNAM. Ha dirigido tesis de licenciatura y posgrado, es coautor de 33 artículos de investigación en revistas indizadas con más de 700 citas, y coautor de tres patentes. Actualmente es Profesor-Investigador del Departamento de Química de la UAM-Iztapalapa.

Su investigación se enfoca en la identificación de inhibidores de enzimas de interés farmacológico de los parásitos Taenia solium, Escherichia coli enteropatógena y el virus SARS-CoV-2, así como en la caracterización estructural y bioquímica de los complejos moleculares resultantes, mediante técnicas experimentales y computacionales, en colaboración con la Facultad de Medicina, el Instituto de Biotecnología de la UNAM, el CIBIOR-IMSS y el Centro Nacional de Biotecnología (CSIC, España).













