

VIII

Simposio

Tendencias actuales en la búsqueda y desarrollo de fármacos

- JUNIO 23 -



CARTEL #08

15:05 A 15:15 H

Título: Diseño, síntesis y efecto citotóxico de análogos del sorafenib

Autores: Jorge Luis Ortiz Díaz, Gabriel Navarrete-Vázquez, Emanuel Hernández-Núñez

Resumen: Diseñar siete compuestos análogos del sorafenib y mediante un análisis de consenso farmacológico evaluar sus propiedades farmacocinéticas, farmacodinámicas, toxicológicas, biofarmacéuticas y citotóxicas para priorizar para la síntesis y evaluación *in vitro* sobre líneas celulares cancerígenas de hígado y de riñón, de los compuestos con mejor perfil farmacológico.

CARTEL #09

15:20 A 15:30 H

Título: Síntesis y biosimulación de bencimidazoles con efecto vasorrelajante y antihipertensivo

Autores: Abraham Alberto Gutiérrez-Hernández, José Luis Medina-Franco, Emanuel Hernández-Núñez, Gloria Ivonne Hernández Bolio, Samuel Estrada-Soto, Gabriel Navarrete-Vázquez

Resumen: La hipertensión arterial es uno de los problemas cardiovasculares más prevalentes en las sociedades mundiales actualmente. En este trabajo se diseñaron racionalmente y sintetizaron (por técnicas convencionales y novedosas en química orgánica) compuestos con potencial actividad vasorrelajante y antihipertensiva como posibles antagonistas del receptor AT1 de angiotensina II. Mediante un análisis de consenso farmacológico los compuestos mostraron buenos perfiles biofarmacéuticos, farmacocinéticos, farmacodinámicos y toxicológicos empleando programas quimiinformáticos. Los modelos de acoplamiento molecular sugieren que los compuestos presentarían afinidad en el sitio de reconocimiento ya que presentaron interacciones con los residuos de aminoácido involucrados en el antagonismo de estos receptores.

CARTEL #10

15:35 A 15:45 H

Título: Diseño y síntesis de ácidos 3-(2-ariloxifenil)propiónicos con acción antihiper glucémica

Autores: Norma Angélica Hernández Martínez, Gabriel Navarrete-Vázquez, Emanuel Hernández-Núñez, Gloria Ivonne Hernández-Bolio

Resumen: Este proyecto consiste en la síntesis de derivados del ácido-*o*-hidroxicinámico, el ácido cinámico pertenece a un grupo de compuestos conocidos como "compuestos fenólicos" los cuales han demostrado actividad antihiper glucémica. Se sintetizarán 6 diferentes compuestos con diferentes sustituyentes. Utilizando diversas herramientas quimiinformáticas se evalúan *in silico* las propiedades farmacocinéticas, farmacodinámicas, biofarmacéuticas y toxicológicas los compuestos para realizar un análisis de consenso farmacológico y así elegir los compuestos a priorizar en su síntesis para posteriores análisis espectroscópicos y evaluaciones *in vitro* e *in vivo*.

CARTEL #11

15:50 A 16:00 H

Título: Estudio computacional de la unión covalente de derivados de benzamida en la β -tubulina de *Botrytis cinerea*

Autores: M. Andrés Velasco-Saavedra, Rodrigo Aguayo-Ortiz

Resumen: *Botrytis cinerea* es un hongo patógeno causante de la destrucción de una amplia variedad de cultivos. Para detener su crecimiento, se emplean compuestos fungicidas derivados de benzamida, como la zoxamida y sus análogos. Estudios experimentales han mostrado que estas moléculas se unen covalentemente a la C239 de la β -tubulina, inhibiendo la polimerización de los microtúbulos. En este trabajo, se identificó que estos compuestos se unen al sitio del nocodazol para ejercer su efecto. Asimismo, empleando métodos alquímicos, se analizó el efecto de mutaciones relacionadas con la aparición de resistencia o aumento de sensibilidad, concordando con la información experimental.

CARTEL #12

16:05 A 16:15 H

Título: Síntesis de ácidos bis(carbamoi)benzoicos a partir del anhídrido trimelítico, evaluación de la actividad antiparasitaria contra *Giardia duodenalis* y toxicidad aguda en modelo murino

Autores: Fabiola Sánchez López, Julio Montes Ávila, Francisco Delgado Vargas, Gabriela López Angulo, Adrián Ochoa Terán

Resumen: La giardiasis es una de las parasitosis más comunes en México, con altas tasas de prevalencia. Sin embargo, existe un déficit en el tratamiento contra *Giardia duodenalis* y se han reportado cepas resistentes a metronidazol, por lo que es necesario el desarrollo de fármacos más eficaces. En este sentido, las reacciones de apertura de anhídridos conducen a la obtención de compuestos como, ácidos bis(carbamoi)benzoico los cuales han demostrado poseer una amplia variedad de actividades biológicas. En este estudio, se propone la síntesis de ácidos bis(carbamoi)benzoico, evaluar su actividad antiparasitaria y determinar la toxicidad aguda en modelo murino.

CARTEL #13

16:20 A 16:30 H

Título: Reposicionamiento de compuestos antiparasitarios derivados de indol, bencimidazol e imidazopiridinas contra cáncer

Autores: Mitzi Noemi Figueroa Quio, Rodrigo Aguayo-Ortiz, Fernando Díaz de León Sánchez, Carlos Alberto Méndez Cuesta

Resumen: El cáncer es un padecimiento que causa muchos estragos en la salud mundial con pocos tratamientos exitosos. Por lo que este trabajo pretende contribuir a encontrar nuevos compuestos para futuros tratamientos. Con esta finalidad, se realizó una búsqueda de compuestos con núcleo de bencimidazol, indol e imidazo[1,2-*a*]piridina con actividad antiparasitaria reportada. Se analizaron con el software Data Warrior para buscar similitudes con moléculas cristalizadas en proteínas del Protein Data Bank, para realizarles un acoplamiento molecular, encontrando proteínas como la 5M5A, blanco terapéutico importante contra el cáncer. Contribuyendo con nuevas propuestas a través del reposicionamiento de fármacos contra esta enfermedad.

CARTEL #14

16:35 A 16:45 H

Título: Cribado virtual basado en ligando de moléculas inhibidoras de la señalización de IL-6 mediante el bloqueo de la proteína gp130 como co-tratamiento para el cáncer de mama triple negativo

Autores: Laisa Paola Chaidés Cervantes, Eyra Liliana Ortiz Pérez, Lorenzo Ulises Osuna Martínez, Gildardo Rivera Sánchez, Timoteo Delgado Maldonado, Alfredo Juárez Saldívar

Resumen: En este trabajo se realizó cribado virtual y acoplamiento molecular de moléculas basado en similitud con bazedoxifeno y subestructura de 5-hidroxiindol en las bases de datos PubChem y MolPort y evaluación de sus propiedades *in silico* como fármacos de administración oral para encontrar moléculas candidatas inhibidoras de gp130/IL-6 como co-tratamiento para TNBC. Se seleccionaron 3 moléculas finalistas: 181-2, 414-2 y 472-2 que lograron aprobar 4 filtros (cribado en base de datos, poses y energía de unión, residuos de interacción y propiedades fisicoquímicas, farmacocinéticas e inhibidoras sobre CYP450) con mejores resultados que las moléculas control.