

Junio 14 • 2023

14:00 a 16:00 h, Vestíbulo del Edificio A

Cartel  
01

### Caracterización *in silico* de las interacciones de fungicidas con la $\beta$ -tubulina de *Botrytis cinerea*

M. Andrés Velasco-Saavedra, Efrén Mar-Antonio, Rodrigo Aguayo-Ortiz

Facultad de Química, UNAM

*Botrytis cinerea* es un hongo patógeno que afecta distintas especies vegetales de consumo humano, siendo el causante de pérdidas económicas significativas en la industria agrícola. Los fungicidas carbendazim (CBZ), dietofencarb (DEF) y zoxamida (ZOX) son ampliamente utilizados contra este patógeno, los cuales actúan interrumpiendo el ensamblaje de los microtúbulos. En este trabajo, se propuso el posible sitio y modo de unión de estos compuestos en la  $\beta$ -tubulina de *B. cinerea* utilizando diferentes aproximaciones de acoplamiento y dinámica molecular. Asimismo, se evaluó el efecto de ciertas mutaciones en la afinidad de los ligandos empleando métodos de transmutación atómica.

Cartel  
02

### Diseño y síntesis de ácidos hidroxámicos como agentes inhibidores de la enzima glioxalasa 1 y pro-ferroptóticos

Josué Martínez Miranda, Francisco Hernández Luis

Facultad de Química, UNAM

En la actualidad, el cáncer es un serio problema de salud a nivel mundial debido a su alta prevalencia y mortandad, si bien existen diversos agentes quimioterapéuticos para su tratamiento la mayoría de estos agentes carecen de selectividad entre células sanas y cancerosas, por lo cual en este proyecto se propone el diseño y la obtención de moléculas bioactivas con posible actividad dual (inhibidores de la enzima glioxalasa-1 e inductoras de ferroptosis) al aprovechar las siguientes características predominantes en las células cancerosas: la sobre expresión de la enzima glioxalasa-1 y su susceptibilidad hacia la ferroptosis.

Cartel  
03

### Identificación de fármacos para su reposicionamiento como inhibidores de Lck en terapia contra cáncer

Diana Paola Rojas González, Luis Jesús Córdova Bahena, Marco A. Velasco Velázquez

Facultad de Medicina, UNAM

Recientemente se ha propuesto a Lck como potencial blanco terapéutico por su participación en la progresión tumoral. Por otro lado, el reposicionamiento de fármacos está cobrando cada vez más importancia en terapia contra cáncer ante la urgencia de nuevos esquemas efectivos. En este proyecto utilizamos herramientas del diseño de fármacos asistido por computadora para caracterizar el comportamiento de un grupo de inhibidores de Lck. A partir de los resultados se propuso una estrategia de cribado virtual para identificar fármacos que emulen el comportamiento de los inhibidores control. Nuestros resultados sugieren que el vasodilatador Udenafil presenta potencial actividad inhibitoria sobre Lck.

Cartel  
04

### Diseño computacional de compuestos contra enfermedades neurodegenerativas

Luis Felipe Hernández Ayala, Eduardo Gabriel Guzmán López, Miguel Reina Tapia, Annia Galano

Universidad Autónoma Metropolitana

En México y el mundo, la población envejece a un ritmo acelerado, se estima que el 12% de la población mexicana tiene más de 65 años y para 2050 se duplicara esta cantidad. Con el envejecimiento de la población, las enfermedades crónico-degenerativas se vuelven un problema de salud pública. En este trabajo, se presentará un protocolo de diseño computacional de moléculas multifuncionales con potencial actividad terapéutica contra enfermedades neurodegenerativas. Este modelo está basado en las propiedades químicas y toma en cuenta su afinidad a receptores específicos, particularmente de las enfermedades de Alzheimer y Parkinson.

Cartel  
05

### Optimización por Modelado Molecular y Obtención *in vitro* de Carboxamidas Heterocíclicas con Potencial Inhibitorio de la Proteína MRP4

Stephani Hernández Castro, Rubén Antonio Romo Mancillas, Edgardo Becerra Becerra, Giovanni Aguilera Durán

Universidad Autónoma de Querétaro

La leucemia linfoblástica aguda (LLA) es el cáncer más común en la población pediátrica. El primer tratamiento de elección es la quimioterapia. Sin embargo, durante el mismo pueden desarrollar quimiorresistencia, debido a la sobreexpresión de la proteína de resistencia a múltiples fármacos 4 (MRP4) quien se involucra en la salida de sustratos endógenos y exógenos que favorecen procesos anticancerígenos en la célula. Por ello, hace necesaria la continua búsqueda de inhibidores selectivos a MRP4. En el presente trabajo se discutirá la optimización y síntesis de moléculas que demostraron tener potencial inhibitorio en MRP4 en un estudio *in silico*.

Cartel  
06

### Cribado virtual, acoplamiento molecular y evaluación in vitro de nuevos inhibidores de la proteína Spike (S) del SARS-CoV-2 para tratamiento de COVID-19

**Luis Donald González-Morales**, Timoteo Delgado-Maldonado, Alma Paz-González, Eyra Ortiz-Pérez, Debashis Bandyaphay, Alfredo Juárez-Saldívar, Gildardo Rivera

*Instituto Politécnico Nacional*

SARS-CoV-2 causó millones de infecciones confirmadas y muertes. Su proteína Spike (S) representa una diana farmacológica atractiva para el desarrollo de nuevos antivirales. S reconoce y se une al receptor celular ACE2-h. El objetivo de esta investigación fue identificar compuestos bloqueadores de S/ACE2-h. Se realizó un cribado virtual en Biofacquim (UNAM). Los compuestos obtenidos se sometieron a acoplamiento molecular y se eligieron los líderes para la predicción de propiedades ADME-Tox y evaluación in vitro. Los estudios condujeron a B-8. Presentó una inhibición del 48% de la interacción S/ACE2-h [50  $\mu$ M]. Mostró efectividad terapéutica y puede utilizarse para desarrollar nuevos antivirales.

Cartel  
07

### Reposicionamiento de fármacos Cerivastatina, Ritonavir, Etopósido y Cefoxitina como inhibidores de InhA de *M. tuberculosis*

**Sebastián Solorio Garay**, Luis Jesús Córdova Bahena, Mayra Silva Miranda, Clara Inés Espitia Pinzón

*Facultad de Medicina e IBO, UNAM*

La tuberculosis (TB) es una de las mayores causas de muerte a nivel mundial. La proteína Enoil-ACP (InhA) de *Mycobacterium tuberculosis*, diana terapéutica de la isoniazida un fármaco muy importante contra TB, es una diana de gran interés en el diseño de fármacos. Mediante técnicas de química computacional se caracterizaron 13 inhibidores de la proteína InhA para diseñar un modelo de farmacóforo para encontrar fármacos que interactúen e inhiban la proteína. Se encontraron 4 fármacos (Cerivastatina, Ritonavir, Etopósido y Cefoxitina) que tienen afinidad a la proteína y cumplen con las características del modelo. Concluimos que estos fármacos son una potencial alternativa al tratamiento de la tuberculosis.

Cartel  
08

### Diseño de novo automatizado y evaluación experimental de inhibidores de ADN metiltransferasas

**Diana Lorena Prado Romero**, José Luis Medina Franco

*Facultad de Química, UNAM*

Las ADN metiltransferasas (DNMTs) son enzimas que catalizan la transferencia de un grupo metilo a las citosinas del ADN. Cambios en la metilación modifican la expresión génica. Los fármacos aprobados azacitidina y decitabina demuestran que la inhibición de DNMTs es una estrategia efectiva para el tratamiento de enfermedades como síndromes mielodisplásicos. Estos presentan desventajas como baja biodisponibilidad y toxicidad, por lo cual es primordial la búsqueda de nuevos inhibidores. En este trabajo presentamos resultados del diseño de novo automatizado de inhibidores de DNMT1, búsquedas por similitud molecular y la evaluación de inhibición enzimática de DNMT1 de compuestos seleccionados.

Cartel  
09

### Regulación de $\gamma$ -secretasa: Un acercamiento desde la simulación molecular

**José María Montes Montiel**, Dulce C. Guzmán Ocampo, Rodrigo Aguayo Ortiz Laura Domínguez Dueñas

*Facultad de Química, UNAM*

El proyecto se centra en el análisis de la proteína  $\gamma$ -secretasa (GS), que está involucrada en la enfermedad de Alzheimer. GS escinde proteínas transmembranales, incluyendo Notch y APP. Las mutaciones en GS aumentan la producción de péptidos beta amiloide (AB) largos que se agregan extracelularmente. El objetivo es estudiar cómo las moléculas pequeñas, como E2012, pueden modular la actividad de GS y buscar nuevas moléculas que puedan hacerlo. Se utilizan simulaciones de dinámica molecular y técnicas quimioinformáticas para describir las propiedades estructurales de GS y su interacción con el sustrato y los moduladores.

Cartel  
10

### Evaluación del espacio químico de compuestos halogenados inhibidores de enzimas cinasas

**Abel Suárez-Castro**, Carlos Jesús Cortés-García, Luis Chacón-García

*Universidad Michoacana de San Nicolás de Hidalgo*

El espacio químico permite analizar de forma gráfica la agrupación de compuestos basado en sus propiedades moleculares. La mayoría de los compuestos que contienen halógeno, presentan un perfil farmacológico favorable. El objetivo del presente trabajo fue calcular la diversidad molecular de inhibidores de enzimas cinasas que posean átomos de halógeno. Se encontraron 425 inhibidores de enzimas cinasas, solo 173 fueron halogenados, destacando su diversidad molecular en cuanto a la capacidad de establecer interacciones no covalentes. La diversidad molecular de estos compuestos nos permite conocer y diferenciar las características farmacológicas de estos inhibidores halogenados de enzimas cinasas.

Cartel  
11

### Determinación del tiempo de residencia de inhibidores nucleosídicos de DOT1L empleando $\tau$ RAMD

**Luis Fernando Colorado-Pablo**, Carlos D. Flores-León, Miguel A. Santos-Contreras, Rodrigo Aguayo-Ortiz

*Facultad de Química, UNAM*

DOT1L es una enzima epigenética que funge como un blanco terapéutico importante en el tratamiento de la leucemia mieloide aguda. Se han desarrollado inhibidores nucleosídicos y no nucleosídicos de esta enzima que bloquean su actividad de metiltransferasa de histonas. Los inhibidores nucleosídicos han demostrado una potente actividad inhibitoria y largos tiempos de residencia en el sitio. En este trabajo, estimamos los tiempos de residencia de inhibidores nucleosídicos de DOT1L mediante simulaciones de dinámica molecular de aceleración aleatoria ( $\tau$ RAMD). La alta correlación entre los tiempos de residencia calculados y experimentales sugieren que este método predice de forma confiable la residencia de inhibidores nucleosídicos.



### Efecto citotóxico de derivados de naftalenacetamidas

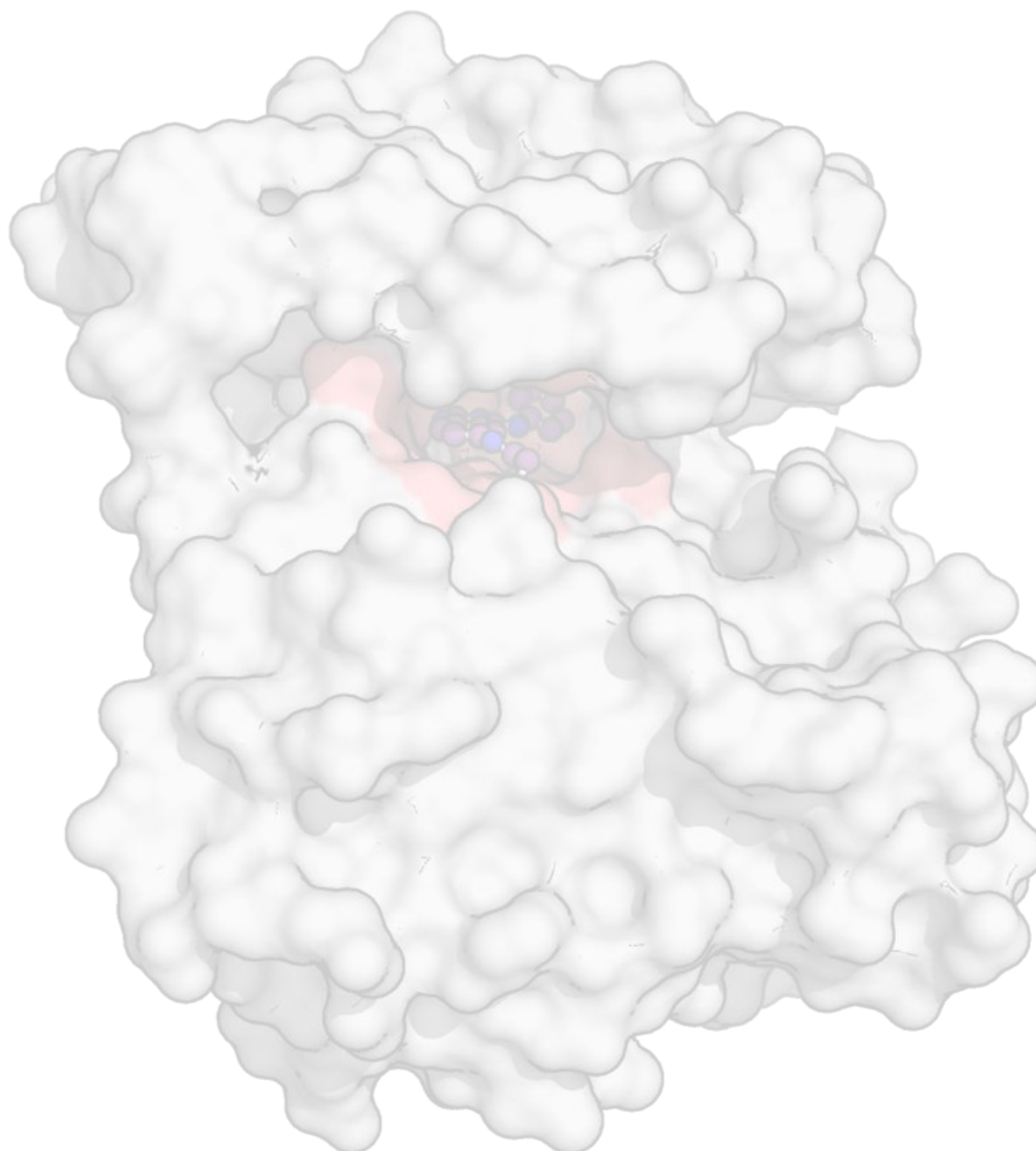
**Cristina Martínez-Nava**, Carlos Alberto Méndez-Cuesta, Cuauhtémoc Pérez-González, Miguel Ángel Zavala-Sánchez  
*Universidad Autónoma Metropolitana - Unidad Xochimilco*

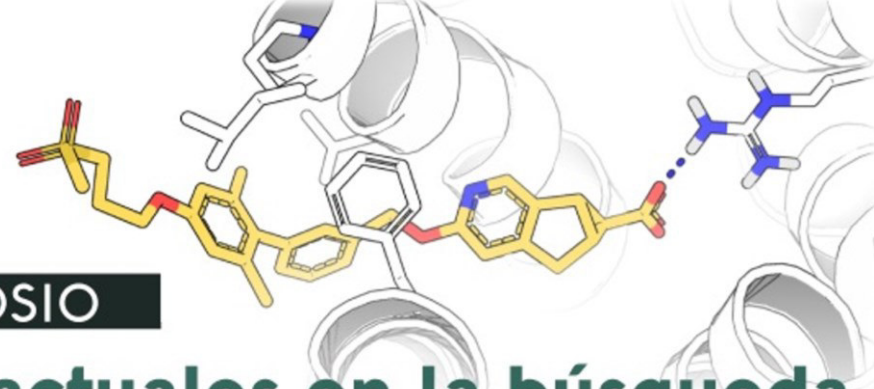
Este proyecto tiene como objetivo el diseño, síntesis y caracterización de la actividad citotóxica de los clorhidratos de naftoxiacetamidas. Para ello, se siguió la metodología descrita por Babad & Ben-Ishai con modificaciones para la síntesis de acetamidas. Se realizaron los estudios de acoplamiento molecular para identificar las interacciones entre las acetamidas y el receptor  $\sigma_1$ . Se evaluó el efecto citotóxico de los compuestos sobre células cancerígenas (HeLa) mediante el ensayo de MTT. Se realizó una curva concentración-respuesta. Los resultados obtenidos mostraron que las sales presentan actividad citotóxica similar a la mostrada por el control positivo (3.32  $\mu\text{mol/mL}$  de cisplatino).

### Síntesis, biosimulación y bioevaluación de derivados benzimidazólicos con efecto vasorrelajante y antihipertensivo

**Abraham Alberto Gutiérrez-Hernández**, Maximiliano Ibarra-Barajas, Patricia Castro-Moreno, José Luis Medina-Franco, Emmanuel Gaona-Tovar, Samuel Estrada-Soto, Emanuel Hernández-Núñez, Gloria Ivonne Hernández-Bolio, Gabriel Navarrete-Vázquez  
*Facultad de Farmacia, Universidad Autónoma del Estado de Morelos*

Se diseñaron y sintetizaron compuestos benzimidazólicos como antagonistas de los receptores AT1 de angII. Los compuestos diseñados presentaron perfiles biofarmacéuticos, farmacocinéticos, farmacodinámicos y toxicológicos adecuados, siendo hits computacionales seguros; mediante un análisis de consenso farmacológico se eligieron a los compuestos con mejor perfil, para su bioevaluación. El compuesto GAA-1 presentó un antihipertensivo multitarget al ser un antagonista de los receptores AT1 de angII, como Telmisartán, y al ser un bloqueador parcial de los canales de calcio, comparado con Verapamilo.





Junio 15 • 2023

14:00 a 16:00 h, Vestíbulo del Edificio A

Cartel  
14

### Inhibidores de la PTP1B identificados de una quimioteca de productos naturales

**Miriam Díaz Rojas**, Martín González Andrade, Rodrigo Aguayo-Ortiz, Rogelio Rodríguez Sotres, Araceli Pérez Vásquez, Abraham Madariaga Mazón, Rachel Mata  
*Facultad de Química, UNAM*

Las quimiotecas de productos naturales (PNs) han sido una fuente de inspiración para el desarrollo de nuevos fármacos. En este proyecto, se analizó una pequeña quimioteca de 99 PNs provenientes de plantas medicinales mexicanas y hongos (1-99). Además, se realizó un cribado enzimático y, mediante diversas herramientas quimioinformáticas, se detectaron compuestos "hit" o activos iniciales y compuestos "scaffold hops" que son estructuralmente diferentes y con la misma actividad biológica.

Cartel  
15

### Síntesis y actividad biológica de análogos de Ciclopentanpiridinona

**Nancy Vanessa Castro Perea**, Julio Cesar Abarca Magaña, Leonor Huerta Hernández, Daniel Chávez Velasco  
*Instituto Tecnológico de Tijuana*

Actualmente se busca obtener compuestos nuevos que presenten potencial biológico y que puedan resolver la problemática del sida. En los últimos años, los derivados de piridinona han despertado el interés en la investigación debido a que se unen en el sitio alostérico de la transcriptasa inversa, mostrando actividad contra cepas nativas y mutantes del VIH-1. En este proyecto se sintetizaron derivados de ciclopentanpiridinona de tipo alquilamina y alquiloxi de longitud de cadena diferente, hasta el momento se ha evaluado la viabilidad celular en células JLTRG demostrando que estos compuestos no presentan citotoxicidad para las células JLTRG a concentraciones micromolares.

Cartel  
16

### Preparación y actividad giardicida de bencimidazoles azufrados

**Carlos Martínez-Conde**, Jaime Escalante-García, Emanuel-Hernández Núñez, Jessica N. Sánchez-Carranza, Lilián Yépez-Mulia, Reyna Elizabeth Barbosa-Cabrera, Gabriel Navarrete-Vázquez  
*Facultad de Farmacia, Universidad Autónoma del Estado de Morelos*

Las protozoosis causadas por *G. lamblia* son de las parasitosis más comunes a nivel mundial y un cuyo tratamiento farmacológico se emplean fármacos de tipo nitroimidazoles y carbamatos de bencimidazol. Sin embargo, los compuestos de tipo nitroimidazoles están asociados a carcinogenicidad y hepatotoxicidad, así como también se ha reportado la resistencia de los parásitos frente a los compuestos de tipo carbamato de bencimidazol aunado a su baja solubilidad y biodisponibilidad. Por lo que es de suma importancia contar con alternativas terapéuticas que pudieran contribuir al desarrollo de moléculas antiparasitarias más eficientes y menos efectos adversos.

Cartel  
17

### Determinación del efecto de mutaciones de resistencia a orizalina en *Toxoplasma gondii* empleando métodos computacionales

**Carlos Daniel Flores León**, Laura Domínguez Dueñas, Rodrigo Aguayo Ortiz.  
*Facultad de Química, UNAM*

La orizalina es una dinitroanilina que inhibe la polimerización de tubulina en plantas y protozoarios parásitos como resultado de su interacción con la subunidad de  $\alpha$ -tubulina. Ensayos de mutagénesis en *T. gondii* identificaron mutaciones en residuos de  $\alpha$ -tubulina que conllevaron a la resistencia al tratamiento con ese inhibidor. En este trabajo, empleamos dinámica molecular y transmutación atómica para estudiar el efecto de las mutaciones en la afinidad del ligando. El análisis mostró que las mutaciones L136F y V202F disminuyen la afinidad del inhibidor, T239I y V252L disminuyen la flexibilidad de la proteína y R243S impide la internalización del ligando.

Cartel  
18

### El diseño factorial reducido como alternativa en la optimización molecular

**Miguel Guerrero-González**, María Elena Campos-Aldrete, Marco Antonio Meraz-Rios  
*Escuela Nacional de Ciencias Biológicas-IPN*

En el desarrollo de fármacos, lograr la optimización de determinadas propiedades farmacológicas durante el desarrollo de entidades moleculares puede ser un proceso difícil, para ello se cuenta con herramientas como el QSAR, sin embargo estas metodologías tienden a ser costosas debido al número de moléculas necesarias para implementarlo, como opción poco explorada, tenemos reportado la utilización del diseño factorial reducido en la optimización de un grupo de moléculas en la inhibición de COX, por lo que dar a conocer esta herramienta podría dar como resultado en la rápida y a su vez económica optimización de entidades farmacológicas.



Cartel  
19

### Cribado virtual de fármacos aprobados por la FDA contra la Triosa Fosfato Isomerasa de *Giardia lamblia*

**José Miguel Quintero Solano**, Timoteo Delgado Maldonado, Eyra Liliana Ortiz Pérez, Alonzo González González, Alfredo Juárez Saldivar, Lorenzo Ulises Osuna Martínez, Gildardo Rivera Sánchez

*Instituto Politécnico Nacional y Universidad Autónoma de Sinaloa*

La giardiasis es una enfermedad desatendida que afecta a la población de escasos recursos en países en vías de desarrollo. El presente trabajo tuvo como objetivo reposicionar fármacos FDA para combatir la giardiasis. Se llevó a cabo un cribado virtual basado en estructura mediante acoplamiento molecular de las quimiotecas ZINC20 y DrugBank para evaluar la afinidad y el perfil de interacciones con la Triosa Fosfato Isomerasa de *Giardia lamblia* (GITIM) y su selectividad sobre la TIM humana. Los fármacos 823, 258 y 73 presentaron valores de afinidad altos (-10.5, -8.1 y -7.8 kcal/mol) y selectividad contra GITIM

Cartel  
20

### Identificación de moléculas pequeñas con afinidad de unión a GPER

**Rodolfo Daniel Ávila Avilés**, José Manuel Hernández Hernández

*CINVESTAV; SMEYMER*

El receptor-de-estrógeno-de-proteína-G (GPER) se ha implicado en las rutas de señalización de estrógeno y se ha asociado con diferentes procesos fisiopatológicos; por lo que la modulación de su actividad es de importancia. Realizamos la identificación basada en ligandos de moléculas de unión a GPER basadas en similitud química con (-)-epicatequina. Además, se realizó un cribado basado en estructura para identificar moléculas con mayor afinidad de unión a GPER. Para esto se realizaron cálculos de acoplamiento molecular rígido y flexible, dinámica molecular y cálculos ABF; prediciendo 4 moléculas con una alta capacidad de unión a GPER con una interacción energéticamente favorable.

Cartel  
21

### Determinación de posibles ligandos para el ligando del receptor activador de NF- $\kappa$ B RANKL

**Ana Victoria Arredondo Robles**, Rodolfo Daniel Ávila Avilés, y José Manuel Hernández Hernández

*CINVESTAV; SMEYMER*

La interacción RANKL-RANK induce la ruta NF- $\kappa$ B, desencadenando respuestas inflamatorias y la inhibición de la diferenciación miogénica. Se analizaron análogos al derivado 20 identificado por Miyata y colaboradores como un ligando inhibitorio para RANKL. Se identificaron moléculas químicamente similares mediante Swiss Similarity y Zinc Drug Like. Se realizaron acoplamientos moleculares rígidos y flexibles, donde el ligando 239 mostró el resultado más favorable ( $\Delta G = -7.64$  kcal/mol). Mediante dinámica molecular de 200ns, se computaron los RMSD, RMSF y radio de giro. Los ligandos presentan comportamientos estables. La energía libre, obtenida mediante cálculos ABF, fue más favorable para la molécula 333 ( $\Delta G = -21.31$  kcal/mol).

Cartel  
22

### Búsqueda *in silico* de compuestos inhibidores de la enzima MPro del SARS-CoV-2

**Brayan Leonardo Méndez-Molina**, Timoteo Delgado-Maldonado, Eyra Ortiz-Pérez, Israel García-León, Gildardo Rivera-Sánchez

*Instituto Politécnico Nacional*

El virus del SARS-CoV-2 ha ocasionado aproximadamente 7 millones de muertes desde 2020. El objetivo de este estudio fue identificar nuevos compuestos con actividad potencial inhibitoria contra la enzima Proteasa Principal (MPro). Se realizó un cribado virtual basado en ligando en ZINC20 y MolPort usando compuestos inhibidores co-cristalizados y no co-cristalizados. Los compuestos se evaluaron a través de acoplamiento molecular contra la enzima MPro y se seleccionaron aquellos con mejor puntaje de acoplamiento y perfil de interacciones. El compuesto M891 presentó el mejor valor de afinidad (-10,503 kcal/mol) e interacciones con His41, Glu166, Asp187 de la enzima Mpro.

Cartel  
23

### PBM-342 un nuevo ligando específico al receptor activado por proliferadores de peroxisomas beta (PPAR $\beta/\delta$ ), y su rol en la proliferación y diferenciación de mioblastos

**Manuel Gutiérrez Rodríguez**, José Manuel Hernández Hernández, Rodolfo Daniel Ávila Avilés, Luis Chacón-García

*CINVESTAV; SMEYMER*

PPAR $\beta/\delta$  es un factor de transcripción que se ha visto involucrado en la diferenciación de células musculares esqueléticas. Identificamos mediante cribado virtual basado en ligando, Docking Molecular y Simulaciones de Dinámica Molecular, una molécula con alta afinidad y estabilidad hacia PPAR $\beta/\delta$ , la cual denominamos PBM-342, contando con una energía libre de -12.33kcal/mol. La administración de PBM-342 en células C2C12 disminuye la fusión y calibre de miotubos, así como la expresión de los genes musculo-específicos MHC-IIB y MyoG, y los genes blanco de PPAR $\beta/\delta$  CD36 y FOXO1. Lo que indica que PBM-342 actúa como un antagonista que inhibe la diferenciación muscular.

Cartel  
24

### Estudio *in silico* de la activación del receptor CXCR3B en complejo con la quimiocina CXCL10.

**Alex Daniel Rivera Vargas**, Giovanni Aguilera-Durán, Antonio Romo-Mancillas

*Universidad Autónoma de Querétaro*

El receptor a quimiocinas CXCR3B está envuelto en diferentes enfermedades, promueve señales proapoptóticas en estados tempranos del vitiligo y señales antiproliferativas en varios tipos de cáncer. Actualmente, no existe una estructura resuelta de CXCR3B. En este trabajo, un modelo por homología de CXCR3B y su quimiocina CXCL10 fueron construidos para estudiar las interacciones entre ellos. Adicionalmente una dinámica molecular tipo Coarse-Grained fueron realizadas para observar las interacciones polares, rotaciones y RMSD de los segmentos transmembranales de CXCR3B solo y en complejo con CXCL10 para definir el estado meta-activo de CXCR3B.

Cartel  
25

### Modelado molecular de SV2A para el diseño de nuevos anticonvulsivos

José Manuel Álvarez Baltazar, Rubén Antonio Romo Mancillas, Giovanni Aguilera Durán  
Universidad Autónoma de Querétaro

La epilepsia es un trastorno neurológico que se caracteriza principalmente por convulsiones recurrentes debido a descargas eléctricas excesivas en el cerebro. Aproximadamente un tercio de la población no responde favorablemente al tratamiento. SV2A es una proteína membranal de las vesículas sinápticas reguladora de la actividad cerebral, los racetams tienen como diana biológica a esta proteína. En este trabajo se realizó el estudio computacional de SV2A para el diseño de nuevos anticonvulsivos, obteniendo la estructura tridimensional de la proteína y nuevas moléculas análogas de los racetams.

Cartel  
26

### Búsqueda de un inhibidor de alta afinidad de la unión WDR5-MLL1 y su caracterización *in vitro*

Erick Bahena Culhuac, Rodolfo Daniel Ávila-Avilés, José Manuel Hernández-Hernández  
CINVESTAV-IPN

El complejo MLL1-WDR5 es de importancia médica por ser asociado a diferentes patologías. Sin embargo, solo existe un inhibidor de la interacción comercialmente disponible, OICR-9429, que presenta una afinidad moderada y características ADME no favorables. Para esto se realizó un screening-virtual para moléculas químicamente similares a OICR-9429. Mediante análisis de docking molecular rígido y flexible y características AMDE se determinaron 4 moléculas candidatas. Estas se sometieron a una simulación molecular y al análisis de trayectoria, se determinó su energía libre de unión mediante MMGBSA, y se propone al candidato 173 como una molécula de unión a WDR5.

