

VIII

Simposio

Tendencias actuales en la búsqueda y desarrollo de fármacos

- JUNIO 22 -



CARTEL #01

15:05 A 15:15 H

Título: Síntesis y caracterización de los ácidos 2-(isoindolin-2-il) derivados de L- α -aminoácidos y su evaluación *in silico* hacia el receptor GABA_A

Autores: Santiago González-Periañez, Fernando Rafael Ramos-Morales, José Luís Olivares-Romero, Jorge Omar Gómez-García

Resumen: La epilepsia es un problema de salud mundial que afecta a más de 65 millones de personas. Por ello, en este trabajo se diseñaron 12 isoindolinas derivadas de L- α -aminoácidos como agentes moduladores del receptor GABA_A. Se evaluaron teóricamente las propiedades fisicoquímicas y toxicológicas de los ligandos y cumplieron con la regla 5 de Lipinski. Además, se realizó acoplamiento molecular (*docking*), obteniéndose tres compuestos con mayor afinidad que los controles (Diazepam y GABA). También, se realizó la síntesis de un análogo ácido de isoindolina y tres ésteres de isoindolina, con una nueva metodología de síntesis verde (microondas) obteniendo rendimientos del 80-90%.

CARTEL #02

15:20 A 15:30 H

Título: Diseño y síntesis de nuevos derivados estructurales del ácido acexámico y su evaluación *in silico* como inhibidores de histonas desacetilasas

Autores: Gerardo Morales Herrejón, Humberto Lubriel Mendoza Figueroa y José Correa Basurto

Resumen: Las histonas desacetilasas (HDACs) son un blanco farmacológico adecuado en la modulación selectiva de los procesos epigenéticos del cáncer. Al respecto, se presenta la propuesta del diseño y síntesis de nuevos inhibidores de HDACs abordando metodologías *in silico* que proyectan su potencial uso como moduladores epigenéticos en la génesis y progresión de procesos cancerígenos. Los derivados estructurales del ácido acexámico, mejor evaluados *in silico*, se sintetizaron vía la reacción de acoplamiento de amida empleando 1,1-carbonilimidazol de manera eficiente y con buena pureza, lo que permite su evaluación *in-vitro* a corto plazo.

CARTEL #03

15:35 A 15:45 H

Título: Síntesis y caracterización de 6H-1,2-oxazin-6-onas. Evaluación de su actividad antibacteriana contra cepas multirresistentes de *S. aureus* y *E. coli*

Autores: Hugo Enrique Aguirre-Madrugal, Julio Montes-Avila, Francisco Delgado-Vargas, Gabriela López-Angulo, Ignacio Alfredo Rivero-Espejel

Resumen: Actualmente se cuenta con registros de altos índices de infecciones causadas por bacterias multirresistentes, que debido al mal uso de antibióticos originan resistencia bacteriana. Esto ha implicado la búsqueda de nuevas alternativas para el desarrollo de nuevos fármacos. Investigaciones recientes sitúan a las cetonas α,β -insaturadas y a sus derivados, como agentes potencialmente antimicrobianos. En el presente trabajo se propuso sintetizar oxazinonas obtenidas por amonólisis, partiendo de β -cianocetonas como precursores y se evaluó su actividad antibacteriana contra bacterias multirresistentes (i.e., *Staphylococcus aureus* y *Escherichia coli*) mediante el método de microdilución en caldo.

CARTEL #04

15:50 A 16:00 H

Título: Estudio computacional de la interacción de derivados de la orizalina con la α -tubulina de protozoarios parásitos

Autores: Carlos Daniel Flores León, Rodrigo Aguayo-Ortiz

Resumen: Los derivados de la dinitroanilina presentan actividad antiprotozoaria como resultado de su interacción con la α -tubulina. Es necesario evaluar los diferentes derivados y las variaciones en la secuencia de aminoácidos entre organismos susceptibles y no susceptibles para poder diseñar nuevos compuestos antiprotozoarios. En este trabajo, se realizaron estudios de acoplamiento y dinámica moleculares de las tres dinitroanilinas más relevantes. Adicionalmente, se analizó el tiempo de residencia de los ligandos en la tubulina con el fin de determinar la importancia de la selectividad termodinámica y cinética de este grupo de compuestos hacia las estructuras de α -tubulina.

CARTEL #05

16:05 A 16:15 H

Título: Diseño, síntesis y actividad farmacológica de bencimidazoles azufrados

Autores: Carlos Martínez-Conde, Gabriel Navarrete-Vázquez, Blanca Iris Colín-Lozano, Jaime Escalante-García, Emanuel Hernández-Núñez, Jessica Nayelli Sánchez-Carranza

Resumen: Las enfermedades causadas por helmintos y protozoarios afectan principalmente a países en vías de desarrollo, sin embargo, tienen una prevalencia a nivel mundial. Estas enfermedades representan un problema de salud pública importante; aunado a lo anterior a la toxicidad y el desarrollo de resistencia de los parásitos frente a los compuestos nitroimidazoles y carbamatos de bencimidazol, es de gran importancia la investigación y desarrollo de nuevas moléculas con actividad antiparasitaria. En este proyecto químico-farmacéutico se propone el diseño, la síntesis y evaluación biológica de una serie de compuestos para conocer su posible efecto antiparasitario y citotóxico selectivo.

CARTEL #06

16:20 A 16:30 H

Título: Diseño y síntesis de barbituratos e hidantoínas con afinidad dual sobre blancos terapéuticos relacionados con diabetes

Autores: Samantha Juárez Cruz, Gabriel Navarrete-Vázquez, Emanuel Hernández-Núñez

Resumen: Investigaciones más recientes buscan nuevos compuestos que posean actividad dual agonista tanto para PPAR γ como para GPR40. Las consideraciones para llevar a cabo un diseño racional que permita combinar patrones farmacofóricos, hacer uso del bioisosterismo y el reemplazo biosinonímico, conducen esta búsqueda hacia nuevas moléculas, las cuales puedan mejorar la actividad biológica multitarget. Se pretende que la serie que se propone de barbituratos (JCS 1-6) y de hidantoínas (JCS 7-12) muestren actividad antidiabética debido a su afinidad dual sobre los blancos terapéuticos, los cuales rigen la homeostasis metabólica.

CARTEL #07

16:35 A 16:45 H

Título: Clasificación de estados funcionales de receptores acoplados a proteína G mediante redes neuronales

Autores: Arsenio Natahel Cruz-Cardoso, César León-Pimentel, Guillermo Goode-Romero, Laura Domínguez

Resumen: Alrededor del 34% de fármacos aprobados por la FDA están dirigidos a los receptores acoplados a proteína G (GPCR). Esto se debe a su gran abundancia en el genoma de los mamíferos y su relevancia en cascadas metabólicas. Por estos motivos conocer el estado funcional de estas proteínas es de interés en el desarrollo de nuevos fármacos. Mediante una red neuronal artificial se logró clasificar entre los principales estados funcionales de los GPCR de la familia A, estado agonista y antagonista. El modelo logra un acierto del 93.33% en un grupo de datos desconocidos.