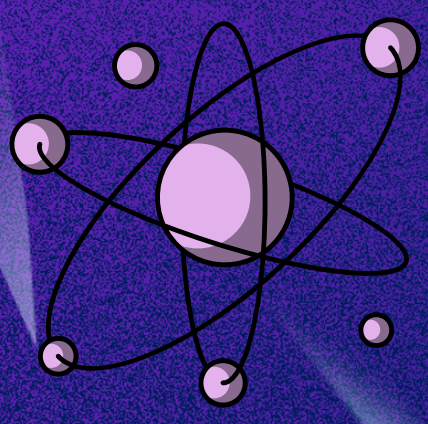
XVI Foro

Síntesis de nuevas entidades químicas con potencial antidiabético: estudio farmacológico *in silico*, *in vitro* e *in vivo*.

Gabriela del Carmen Canche Naal, Rolffy Rubén Ortiz Andrade, Emanuel Hernández Núñez.

Introducción

Los benzotiazoles son heterociclos que han demostrado tener diversas propiedades biológicas, entre ellas la actividad antidiabética mediante la inhibición de la enzima α-glucosidasa, por lo que este proyecto se centra en la búsqueda de análogos de benzotiazol con la actividad biológica ya mencionada.

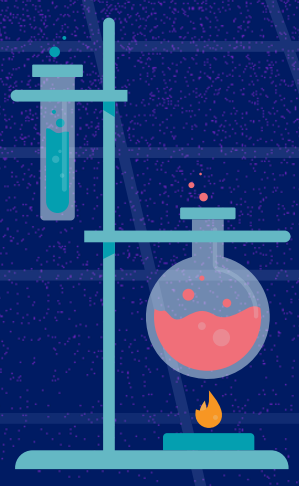


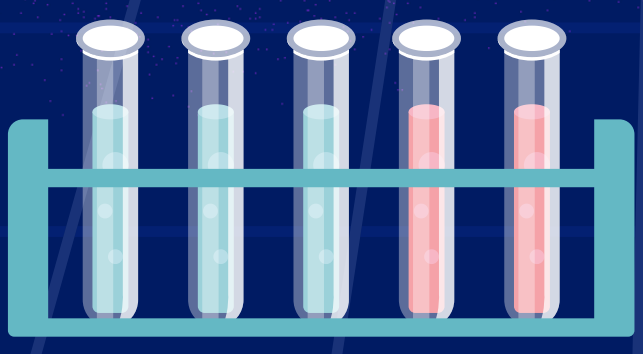
Evaluación in silico

Se diseñaron 60 analógos de benzotiazol de acuerdo a lo reportado en la literatura y se predijeron las propiedades fisicoquímicas, farmacocinéticas y farmacodinámicas mediante métodos computacionales para su evaluación mediante un conceso farmacológico.

Síntesis orgánica

De acuerdo con el conceso farmacológico de los resultados obtenidos en la evaluación in silico, se sintetizaron dos compuestos.



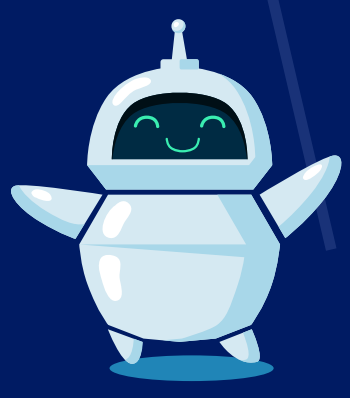


Evaluación biológica

En la evaluación *in vitro*, mediante la evaluación de la inhibición de la enzima α-glucosidasa intestinal, un compuesto fue seleccionada para la evaluación *in vivo*.

Conclusión

A través de los programas computacionales se logró simplificar la cantidad de moléculas a evaluar, ahorrando de esta forma el tiempo y costo en el proyecto de investigación. Se espera que los resultados obtenidos ayuden a investigaciones futuras enfocadas en el diseño de fármacos.



(1) Taha, M.; Ismail, N. H.; Lalani, S.; Fatmi, M. Q.; Atia-Tul-Wahab; Siddiqui, S.; Khan, K. M.; Imran, S.; Choudhary, M. I. Synthesis of Novel Inhibitors of α-Glucosidase Based on the Benzothiazole Skeleton Containing Benzohydrazide Moiety and Their Molecular Docking Studies. Eur J Med Chem 2015, 92, 387–400. https://doi.org/10.1016/J.EJMECH.2015.01.009.

(2) Graham, L. An Introduction to Medicinal Chemistry , 5ta ed.; Oxford, 2013.

(3) Hernández-Núñez, E.; Tlahuext, H.; Moo-Puc, R.; Torres-Gómez, H.; Reyes-Martínez, R.; Cedillo-Rivera, R.; Nava-Zuazo, C.; Navarrete-Vazquez, G. Synthesis and in Vitro Trichomonicidal, Giardicidal and Amebicidal Activity of N-Acetamide(Sulfonamide)-2-Methyl-4-Nitro-1H-Imidazoles. Eur J Med Chem 2009, 44 (7), 2975–2984. https://doi.org/10.1016/J.EJMECH.2009.01.005.

(4) Ortiz-Andrade, R. R.; García-Jiménez, S.; Castillo-España, P.; Ramírez-Ávila, G.; Villalobos-Molina, R.; Estrada-Soto, S. α-Glucosidase Inhibitory Activity of the Methanolic Extract from Tournefortia Hartwegiana: An Anti-Hyperglycemic Agent. J Ethnopharmacol 2007, 109 (1), 48–53. https://doi.org/10.1016/J.JEP.2006.07.002.