

Aplicación de algunas estrategias de Química Farmacéutica en la obtención de compuestos bioactivos

Presenta: Dr. Eduardo Hernández Vázquez

Una de las principales actividades de un Químico Farmacéutico consiste en el diseño y preparación de compuestos para ser empleados como posibles agentes terapéuticos. Para incrementar las posibilidades de éxito, el diseño racional puede apoyarse de técnicas computacionales, o bien, acelerar la búsqueda de farmacóforos mediante una exploración amplia del espacio químico.

En este seminario, se muestran algunos ejemplos de la aplicación de estas estrategias para la obtención de moléculas orgánicas con actividad farmacológica, las cuales pueden someterse a optimización y situarse como eventuales agentes terapéuticos. Específicamente, se mencionará la síntesis de 1,5-diarilpirazoles con actividad antidiabética y anti-obesidad, diseñados a partir de un estudio estructura-actividad cuantitativo tridimensional (QSAR-3D). Por otro lado, se aborda la aplicación de las reacciones de multicomponente como alternativa en la obtención rápida de compuestos estructuralmente diversos con actividad citotóxica, como aza-heterociclos y ciclofanos. Para finalizar, se ilustrará la utilidad del acoplamiento molecular en el diseño de inhibidores de la enzima FabI, la cual es vital durante la biosíntesis de la membrana celular bacteriana.