

## DISEÑO ASISTIDO POR COMPUTADORA Y SÍNTESIS DE MOLÉCULAS BIOACTIVAS PARA DIFERENTES APLICACIONES

*María del Carmen Bustos Martínez<sup>a</sup>, María Fernanda Cruz Fuentes<sup>a</sup>, Ximena Gladín Barrios<sup>a</sup>, Kimberly Desireé Nolasco Mondragón<sup>a</sup>, Ana Victoria Trejo Posadas<sup>a</sup>, Mónica Natalia García Chavarría<sup>a</sup>, María Fernanda Arce Guízar<sup>a</sup>, Andrea Chávez Zepeda<sup>a</sup>, Karla Paola Cobos Vázquez<sup>a</sup>, Gabriel Valle Ibarra<sup>a</sup>, María Fernanda De la Rosa Guardado<sup>a</sup>, Daniela Gallegos Durán<sup>a</sup>, Ana Lorena San Martin Costes<sup>a</sup>, Andrea Ximena Vásquez Ortega<sup>a</sup>, Daniel Martín Hernández Elorza<sup>a</sup>, Alberto Lomelí Juárez<sup>a</sup>, Brenda Ramírez García<sup>a</sup>, Tania Fernanda Salas Romero<sup>a</sup>, Samara Villa Nájera<sup>b</sup>, Marco A. Loza-Mejía<sup>c</sup>*

<sup>a</sup> Facultad de Ciencias Químicas, Universidad La Salle

<sup>b</sup> Facultad de Ingeniería, Universidad La Salle

<sup>c</sup> Departamento de Ciencias Químicas, Vicerrectoría de Investigación, Universidad La Salle

[marcoantonio.loza@lasalle.mx](mailto:marcoantonio.loza@lasalle.mx)

### Resumen

En los proyectos desarrollados en el marco del Verano Lasallista de Investigación 2025 en el área de diseño y síntesis de moléculas bioactivas, se diseñaron diversas estructuras y se evaluó su potencial farmacológico utilizando acoplamiento molecular y herramientas químicoinformáticas. Asimismo, se exploró el uso de esta aproximación para evaluar moléculas con otras aplicaciones en campo de los aditivos alimentarios y de las ciencias ambientales. Varias de las moléculas fueron sintetizadas y su evaluación biológica está en curso en estos momentos.

### Introducción

El diseño de moléculas bioactivas asistido por computadora se ha consolidado como una herramienta esencial en la investigación farmacológica moderna. Esta estrategia permite acelerar el descubrimiento de compuestos con potencial terapéutico mediante la integración de modelos computacionales, simulaciones moleculares y análisis estructurales, reduciendo significativamente los costos y tiempos de desarrollo [1]. Aunque típicamente se ha empleado en el ámbito de la Química Farmacéutica, se ha usado también para el desarrollo de otras moléculas con aplicaciones en el área de alimentos y de las ciencias ambientales[2]. En los proyectos realizados durante el Verano Lasallista de Investigación 2025, en el campo del diseño y síntesis de moléculas bioactivas, se empleó esta estrategia para diseñar compuestos con distintas aplicaciones: un grupo de compuestos como anticancerígenos en colaboración con el Instituto Mexicano del Seguro Social; otro más como inhibidores de la formación de biopelículas microbianas con potencial aplicación en farmacología y en ciencias ambientales en conjunto con la Facultad de Ciencias Químicas y un tercer grupo de moléculas como auxiliares en la prevención del deterioro cognitivo en colaboración con el Departamento de Medicina y Salud. Un cuarto proyecto buscó las propiedades estructurales que caracterizan a compuestos edulcorantes con vistas al diseño de este tipo de aditivos.

### Metodología

En todos los proyectos se partió de una estructura base a la cual se le realizaron modificaciones estructurales para generar una quimioteca virtual que fue evaluada por Memorias del Concurso Lasallista de Investigación, Desarrollo e innovación

Verano Lasallista de Investigación 2025

Vol. 12, Núm. 3, pp. 24-25, 2025

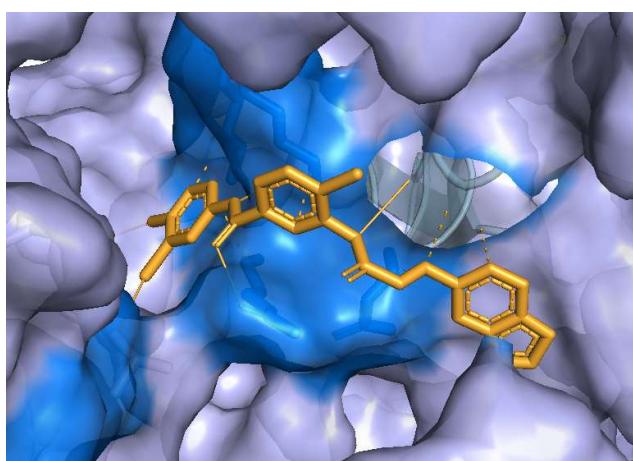
Universidad La Salle México

24

acoplamiento molecular (*docking*) y herramientas quimioinformáticas utilizando condiciones y metodologías previamente publicadas y validadas [3]. Se seleccionaron los compuestos que tenían un perfil farmacológico *in silico* más favorable para ser sintetizados. La preparación de las moléculas más prometedoras empleó materias primas disponibles en el laboratorio y se caracterizaron preliminarmente utilizando espectroscopia IR y RMN.

## Resultados

En todos los proyectos se identificaron aspectos estructurales relevantes para la bioactividad de las moléculas planteadas, a partir del análisis de los complejos ligando-receptor como el mostrado en la Figura 1. A pesar de lo limitado del tiempo de la estancia, en los cuatro proyectos se tuvieron avances significativos los cuales se describen en la Tabla 1.



**Figura 1.** Ejemplo de diagrama ligando-receptor [LR] que se genera en los estudios computacionales

**Tabla 1.** Avances de los proyectos planteados en la Estancia

Proyecto	Avances principales
Anticancerígenos	Se sintetizaron cuatro de los compuestos proyectados
Inhibidores de biopelícula microbiana	Se sintetizaron cuatro de los compuestos proyectados
Auxiliares en la prevención del deterioro cognitivo	Se sintetizaron dos de los compuestos y uno fue evaluado <i>in vivo</i>
Diseño de edulcorantes	Se identificaron interacciones clave entre los edulcorantes y los receptores TAS1R

## Conclusiones

En los proyectos planteados a realizarse en esta estancia de investigación se obtuvieron avances significativos en la etapa de diseño, evaluación *in silico* y la síntesis de los compuestos proyectados. En curso se encuentra la comprobación de sus efectos biológicos a través de la red de colaboradores de nuestro grupo de trabajo.

## Referencias

1. M. Kontoyianni, “Docking and Virtual Screening in Drug Discovery,” in *Methods in molecular biology* (Clifton, N.J.), vol. 1647, 2017, pp. 255–266.
2. F. Espinosa-López, K. Pelcastre-Guzmán, A. Cerón-Nava, A. Rivera-Noriega, M. A. Loza-Mejía, and A. Islas-García, “Sustainable Remediation Using Hydrocarbonoclastic Bacteria for Diesel-Range Hydrocarbon Contamination in Soil: Experimental and In Silico Evaluation,” *Sustain. 2025, Vol. 17, Page 5535*, vol. 17, no. 12, p. 5535, Jun. 2025, doi: 10.3390/SU17125535.
3. M. A. Loza-Mejía and J. R. Salazar, “Sterols and triterpenoids as potential anti-inflammatories: Molecular docking studies for binding to some enzymes involved in inflammatory pathways,” *J. Mol. Graph. Model.*, vol. 62, 2015, doi: 10.1016/j.jmgm.2015.08.010.