

# **Modelado Molecular. Relación Estructura-Actividad Biológica**

**cDr. Oscar Zuñiga Lemus**

Desde hace cerca de 40 años el paradigma de Relación Estructura-Actividad (SAR por sus siglas en inglés Structure-Activity Relationships) encontró su camino para su uso en la práctica agroquímica, farmacéutica, toxicológica y eventualmente muchas caras de la química. Las funciones de esta técnica son descritas por atributos electrónicos, hidrofobicidad y propiedades estéricas de las moléculas, con lo cual se han venido desarrollaron diversas técnicas computacionales que han delineado y refinado las variables que definen este paradigma.

Análisis rigurosos y finos de variables independientes han conducido a una expansión en el desarrollo de descriptores moleculares los cuales están basados en las interacciones átomo-átomo que ocurren entre las moléculas, tales descriptores son derivados de cálculos de química cuántica y espectroscopia. Estos descriptores han permitido la mejora en los procedimientos del cribado de alto rendimiento (high-throughput screening), así mismo ha permitido la búsqueda de numerosos compuestos similares bajo condiciones de estudio estándar; que pueden presentar actividad biológica y de esta manera minimizar el riesgo de combinar variables de muchas fuentes que aumenten el tiempo en el proceso de búsqueda.

El tema central del la farmacología molecular y el entendimiento de las bases de estudios de estructura-actividad, se han enfocado en la elucidación de la estructura y función de receptores que reconocen los fármacos para que se produzca un efecto terapéutico. De manera general es aceptado que interacciones químicas exógenas y endógenas se generan en el sitio de unión de un receptor específico y que estas interacciones las cuales están determinadas por fuerzas intramoleculares, deben o no afectar la respuesta entre el receptor y el fármaco en el sitio de acción.

En este trabajo se exponen las bases del modelado molecular y su uso en la búsqueda del conocimiento que nos permita elucidar las interacciones que ocurren cuando un fármaco interactúa con el sitio activo de una proteína blanco, lo que conduce a un efecto farmacológico y de esta manera poder modificar el fármaco para mejorar su acción terapéutica.

**Viernes 20 de enero 12:00 hrs. Auditorio de la Universidad**