



Combatiendo enfermedades desde la computadora: Acoplamiento y dinámica molecular en el descubrimiento de nutraceuticos

María Elena Astorga Huerta 

Estudiante de Licenciatura en Biotecnología, Facultad de Ciencias Biológicas, Benemérita Universidad Autónoma de Puebla, Puebla, México.

*Email: maria.astorgah@alumno.buap.mx

3 de Octubre de 2024

DOI: <http://doi.org/10.5281/zenodo.13883463>

Editado por: Jesús Muñoz-Rojas (Instituto de Ciencias, Benemérita Universidad Autónoma de Puebla).

Revisado por: Claudia Beatriz Laug García (Instituto de Ciencias, Benemérita Universidad Autónoma de Puebla).

Apoyo en la maquetación: Luz del Carmen Cortés Reyes (Estudiante de Bioquímica Clínica, Universidad de las Américas Puebla, Puebla, México).

Colección de ESMOS

Resumen

La charla aborda un ejemplo de las múltiples aplicaciones de las herramientas computacionales en la biotecnología, específicamente en el

descubrimiento de nutraceuticos y está basada en un artículo cuyo título traducido es: “Acoplamiento molecular multiobjetivo basado en estructuras y simulación dinámica de genistina, una isoflavona derivada de la soya, como posible inhibidor de las proteínas de señalización del cáncer de mama” [1].

Los nutraceuticos son sustancias que proporcionan beneficios médicos o de salud, como prevención y el tratamiento de enfermedades, que además pueden considerarse alimentos o un componente de los alimentos. En la charla se aborda el estudio de la genistina, una isoflavona que puede ser encontrada en la soya como posible inhibidor de las proteínas de señalización del cáncer de mama, el tipo de cáncer más frecuente y la causa más común de muerte por cáncer en mujeres a nivel mundial [2].

Dentro de las herramientas computacionales que se utilizaron para llevar a cabo el estudio, basado en estructuras y simulación dinámica, se encuentran el docking o acoplamiento molecular, predicción de parámetros ADME (Absorción, Distribución, Metabolismo y Excreción), farmacocinética y dinámica molecular [3, 4].

Las proteínas de señalización del cáncer de mama que se sometieron a docking molecular en Autodock Vina para estudiar su interacción con la genistina fueron ER-alfa y ER-beta receptores de estrógeno, HER 2 receptor-2 del factor de crecimiento epidérmico humano, MUC1 glicoproteína de la superficie celular, CRMP-2 la proteína mediadora de respuesta a colapsina tipo 2 y CA 15-3 antígeno 15.3 del cáncer de mama.

Los resultados de farmacocinética y parámetros ADME mostraron que en una primera aproximación teórica basada en comparación de estructuras, la genistina cumple con todos los parámetros requeridos para un excelente fármaco novedoso. De los resultados de docking se analizaron las energías de interacción, número y tipo de interacciones con los residuos aminoacídicos, así como comparación con los controles tanto negativos como positivos de cada proteína, y la de mejores resultados fue CA 15-3 por lo que a este complejo CA 15-3-genistina se aplicaron cálculos de dinámica molecular.

En conclusión, los resultados obtenidos *in silico* muestran que la genistina tiene potencial como agente anticancerígeno para continuar con su estudio de forma experimental y este es sólo un ejemplo cómo las herramientas computacionales pueden ser un primer filtro en el descubrimiento de fármacos y nutraceuticos para hacer el proceso de búsqueda más rápido y con máximo aprovechamiento de recursos.

Palabras clave: Genistina; docking; modelamiento; cáncer; simulación molecular.

<https://sites.google.com/view/esmosbuap/esmos-2024/esmos-73>

Referencias

- [1]. Elkhalfa AEO, Al-Shammari E, Kuddus M, Adnan M, Sachidanandan M, Awadelkareem AM, *et al.* Structure-Based Multi-Targeted Molecular Docking and Dynamic Simulation of Soybean-Derived Isoflavone Genistin as a Potential Breast Cancer Signaling Proteins Inhibitor. *Life*, 2023; 13(8): 1739. Disponible en: <https://www.mdpi.com/2075-1729/13/8/1739>
- [2]. Organización Panamericana de la Salud. Cáncer de mama. Organización Mundial de la Salud. 2023. Disponible en: <https://www.paho.org/es/temas/cancer-mama>
- [3]. Lozano-Aponte Jorge, Scior Thomas. ¿Qué sabe Ud. Acerca de... Dinámica Molecular?. *Revista Mexicana de Ciencias Farmacéuticas*, 2014; 45(1): 86-88. Disponible en: https://www.scielo.org.mx/scielo.php?script=sci_arttext&pid=S1870-01952014000100010
- [4]. Agu PC, Afiukwa CA, Orji OU, Ezeh EM, Ofoke IH, Ogbu CO, *et al.* Molecular docking as a tool for the discovery of molecular targets of nutraceuticals in diseases management. *Scientific Reports*, 2023; 13(1): 13398. Disponible en: <https://doi.org/10.1038/s41598-023-40160-2>