



## DISEÑO POR DOCKING DE BENZIMIDZOLES DISUSTITUIDOS PARA SER USADOS COMO ANTIINFLAMATORIOS

Andrea Noemi Cruz Medrano<sup>1</sup>, Itzia Irene Padilla Martine<sup>1</sup>, Efrén Venancio García Baez<sup>1</sup> y Elmer Joel Millan Casarrubias<sup>2</sup>

1 Unidad Profesional Interdisciplinaria de Biotecnología, IPN, 2 DIE DEL CINVESTAV, IPN.  
andreaoemcm0@gmail.com

Para el desarrollo de este trabajo se utilizaron 17 bencimidazoles-disustituidos como ligandos y la proteína COX-2 tomado de la base de datos Protein Data Bank como receptor, posteriormente en Gauss View 5.0.1. se optimizaron los ligandos con el método AM1. Se crearon archivos de entrada en el software Autodock Tools 1.5.6. con los receptores, se seleccionaron los archivos con terminación pdb correspondientes al receptor, se añadieron las cargas parciales y se guardaron con la terminación pdbqt, con algoritmo genético, una población de 100 orientaciones colocadas a azar y con un máximo de  $1 \times 10^7$  cálculos. La caja empleada para determinar los límites de búsqueda unión ligando receptor, se dibujó lo suficientemente grande para abarcar toda la proteína. Se analizó la energía de acoplamiento de un blanco (Celecoxib), para tener un punto de comparación entre un medicamento ya estudiado e incluso comercializado que se une al receptor COX-2 con respecto a las moléculas de estudio, los resultados presentados únicamente son predictivos, por lo que pueden llegar a variar en diferentes modelos *in vitro* e *in vivo*, su energía de acoplamiento de Celecoxib se halló de  $-10.23$  Kcal/mol con una constante de disociación (Kd) de  $31.55 \times 10^{-9}$ . De las moléculas de estudio el 2-(4-metilfenil)-1-fenil-1H-bencimidazol presentó una energía de menor de acoplamiento incluso que el medicamento comercial, siendo esta de  $-10.32$  Kcal/mol con una Kd  $21.52 \times 10^{-9}$ , lo cual nos indica una alta probabilidad de unión con la proteína y con ello la alta probabilidad de ejercer efecto terapéutico como antiinflamatorio.

### BIBLIOGRAFIA:

- Pedro Josué Trejo Soto (2011) Síntesis de tres carboxamidas bencimidazòlicas diseñadas por docking como inhibidores potenciales de la Triosafosfato Isomerasa (TIM) de Entamoeba histolytica, México CDMX.
- Vivian Álvarez Islas (2017) Síntesis de derivado de 7-(R-Fenil)-10,10-dimetil-7,10,11,12-tetrahidrobenz[c]acridin-8(9H)-ona y su estudio de docking en el receptor 1D37, Ciudad universitaria CDMX.