

Trabajos libres

Farmacia

Trabajos libres orales

Folio	Nombre del trabajo
4	Actividad antinociceptiva del extracto acuoso de <i>Salvia microphylla</i> Kunth
11	Efecto del extracto acuoso de <i>Parthenium hysterophorus</i> sobre la viabilidad en células de hepatocarcinoma humano y en células mononucleares de sangre periférica humana

Trabajos libres cartel

Área temática	Folio	Nombre del trabajo
1 - Tecnología y análisis farmacéuticos	6	Incorporación de Principio Activo Anticancerígeno Liposoluble en Micelas Poloxámeras.
2 - Farmacia clínica, comunitaria y hospitalaria	35	Percepción del uso de vacunas contra SARS-CoV-2 y sus posibles reacciones adversas
	39	Actividades del farmacéutico en la pandemia por SARS-CoV-2
	44	Aceptación del uso de medios electrónicos para recibir asesoría farmacéutica y de salud
4 - Farmacología y toxicología	8	Inyección intravenosa de mercurio metálico en un pie
	9	Evaluación de la neurotoxicidad del extracto metanólico de <i>Oenothera rosea</i> en la línea celular PC12
5 - Productos naturales y sintéticos con actividad biológica	14	Bioprospección de actinobacterias de la Ciénega de Sisal, Yucatán
	24	Análisis del efecto antioxidante en extractos de brotes de amaranto elicitados con metil jasmonato
	31	Efecto de la elicitación con metil jasmonato en la actividad antioxidante del extracto metanólico de <i>Coleus hadiensis</i>
6 - Química computacional	10	Cribado virtual basado en farmacóforo para la identificación de potenciales inhibidores de la proteína Mpro del SARS-CoV-2
	19	Diseño <i>in silico</i> de un fármaco inhibidor de la DNA polimerasa del virus causante de la peste porcina africana

Trabajos libres orales

Área de Farmacia

Actividad antinociceptiva del extracto acuoso de *Salvia microphylla* Kunth

Gabriela García-Marín^{a*}, María Eva González-Trujano^b, Araceli Pérez-Vásquez^a, Rafael Torres-Colin^c, Rachel Mata-Essayag^a

^a Facultad de Química, Universidad Nacional Autónoma de México, CDMX 04510, México.

^b Instituto Nacional de Psiquiatría, CDMX 14370, México.

^c Instituto de Biología, Universidad Nacional Autónoma de México, CDMX 04510, México.

*E-mail: gabygarcia1996@yahoo.com.mx

Palabras clave: *Salvia microphylla*, nocicepción, medicina tradicional.

Introducción

Salvia microphylla, Kunth (Lamiaceae), comúnmente llamada “mirto”, es una especie ampliamente utilizada en la medicina tradicional mexicana para tratar el dolor¹, por lo que el presente trabajo se enfocó en establecer el efecto antinociceptivo del preparado tradicional y su estudio fitoquímico para contribuir en el desarrollo de parámetros de identificación de la especie.

Metodología

Material vegetal y extracto: *S. microphylla* fue recolectada en Ixtlán de Juárez, Oaxaca, el 6 de junio de 2021. Con las partes aéreas secas (160 g) se preparó una infusión, la cual se secó *in vacuo* para obtener 20.4 g del extracto acuoso seco (EA).

Evaluación de efecto antinociceptivo: EA a diferentes concentraciones se evaluó utilizando las pruebas de estiramiento abdominal². Se analizó la participación de receptores opioides administrando su antagonista, naloxona.

Fraccionamiento e identificación: EA (5.52 g) se sometió a sucesivos fraccionamientos por cromatografía de exclusión (sephadex LH-20) y cromatografía de líquidos. La caracterización estructural de los metabolitos aislados se realizó mediante la aplicación de métodos espectroscópicos y espectrométricos convencionales.

Resultados y discusión

Como se puede observar en la Figura 1, EA produjo efectos antinociceptivos significativos en la prueba de estiramiento abdominal, lo que establece su eficacia y confirma el uso tradicional de la especie como tratamiento para el dolor.

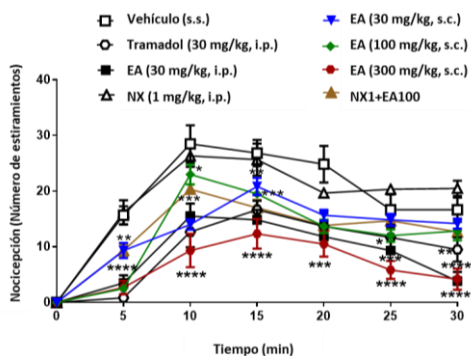


Figura 1. Curso temporal del efecto antinociceptivo de EA (30 mg/kg, i.p.; y 30, 100 y 300 mg/kg s.c.) en la prueba de estiramiento abdominal.

Comparación con el vehículo (Solución salina) y tramadol (TR). Naloxona (NX, 1 mg/kg, i.p.) fue ensayada sola y en combinación con EA (100 mg/kg, s.c.). ANOVA de dos vías, seguido de una prueba de Dunnett. *p<0.05, **p<0.01, ***p<0.001, ****p<0.0001. n=6

El estudio fitoquímico de EA permitió el aislamiento de ocho compuestos; el ácido rosmarínico (1) fue el mayoritario (Figuras, 2 y 3)

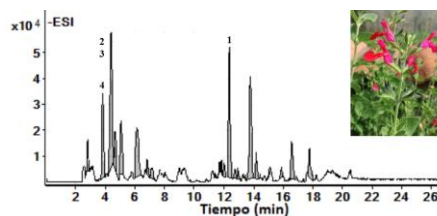


Figura 2. Perfil cromatográfico CLAE-MS de EA.

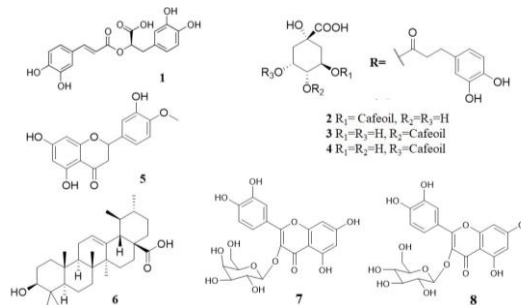


Figura 3. Estructura de compuestos aislados.

Los metabolitos mayoritarios, ácidos cafeicois, han probado tener actividad antinociceptiva previamente^{3,4} así como los flavonoides aislados minoritariamente^{5,6}, lo que puede contribuir al efecto del preparado tradicional.

Conclusiones

El EA mostró un efecto antinociceptivo importante en la prueba de estiramiento abdominal, actividad que puede estar relacionada a metabolitos secundarios aislados con efecto comprobado.

Agradecimientos

Este trabajo fue financiado por el proyecto CONACYT CY011226 y DGAPA-UNAM IN217320. GGM agradece beca CONACYT (846078).

Referencias

- Biblioteca Digital de la Medicina Tradicional Mexicana. <http://www.medicinatradicionalmexicana.unam.mx/> (consultado el 2022-08-18).
- Collier, H. O.; Dinneen, L. C.; Johnson, C. A.; Schneider, C. J. *Pharmacol. Chemother.* **1968**, *32* (2), 295–310.
- Bagdas, D.; Gul, Z.; Meade, J. A.; Cam, B.; Cinkilic, N.; Gurun, M. S. P. *Curr. Neuropharmacol.* **2020**, *18* (3), 216.
- Connelly, A.; et al. *J. Med. Food* **2014**, *17* (12).
- Pérez-Vásquez, A.; et al. *Chem. Biodivers.* **2021**, *18* (8).
- Da Silva, R. Z.; et al. *J. Nat. Med.* **2010**, *64* (4), 402–408.

Efecto del extracto acuoso de *Parthenium hysterophorus* sobre la viabilidad en células de hepatocarcinoma humano y células mononucleares de sangre periférica humana

Miguel Ángel Alfaro Jiménez^a, Alejandro Zugasti Cruz^a, Sonia Yesenia Silva Belmares^b, Luis Enrique Cobos Puc^c, Crystel Aleyvick Sierra Rivera^{a*}

^aLaboratorio de Inmunología y Toxicología, Facultad de Ciencias Químicas, Universidad Autónoma de Coahuila, Blvd. Venustiano Carranza y José Cárdenas Valdés, C.P. 25280, Saltillo, Coahuila, México.

^bDepartamento de Compuestos Bioactivos, Facultad de Ciencias Químicas, Universidad Autónoma de Coahuila, Blvd. Venustiano Carranza y José Cárdenas Valdés, C.P. 25280, Saltillo, Coahuila, México.

^cDepartamento de Bioquímica y Farmacología, Facultad de Ciencias Químicas, Universidad Autónoma de Coahuila, Blvd. Venustiano Carranza y José Cárdenas Valdés, C. P, 25280, Saltillo, Coahuila, México.

*E-mail de autor responsable: crystelsierrarivera@uadec.edu.mx

Palabras clave: *Parthenium hysterophorus*, extracto acuoso, actividad antitumoral.

Introducción

El cáncer de hígado es uno de los principales tipos de cáncer que afecta a la población global, ocasionando en el año 2020 un total de 830,000 defunciones¹. Los agentes quimioterapéuticos son utilizados para el tratamiento del cáncer; sin embargo, se conoce que estos producen también efectos citotóxicos en células normales, como las células mononucleares². *Parthenium hysterophorus* es una planta que es nativa de México usada en la medicina tradicional y de la cual hoy en día es mínima la información que existe sobre su actividad antitumoral. Por lo tanto, el objetivo de este trabajo fue evaluar el efecto del extracto acuoso de *P. hysterophorus* sobre la viabilidad de un modelo *in vitro* de células de hepatocarcinoma humano (línea HepG2) así como en células mononucleares de sangre periférica humana (CMSP).

Metodología

Se preparó un extracto acuoso de las flores de *P. hysterophorus* a partir del método de extracción por decocción (100 °C, 15 min). A continuación, las células tumorales HepG2 (5,000 células/pozo) y las CMSP (250,000 células/pozo) fueron distribuidas en microplacas de 96 pocillos y tratadas con diferentes concentraciones del extracto acuoso (25 – 400 µg/mL) seguido de una incubación de 4 h. Se empleó un control negativo de células no tratadas con extracto (0 µg/mL). Posteriormente, se determinó el efecto del extracto sobre la viabilidad celular a partir del ensayo MTT (bromuro de 3-(4,5-dimetil-2-tiazolil)-2,5-difeniltetrazolio). Se midieron las absorbancias en un lector de microplacas a una longitud de 540 nm. Finalmente, los porcentajes de viabilidad se calcularon con la siguiente fórmula:

$$\% \text{ Viabilidad} = \frac{\text{Absorbancia del tratamiento}}{\text{Absorbancia del control negativo}} \times 100$$

Resultados y discusión

Las concentraciones del extracto acuoso de *P. hysterophorus* disminuyeron significativamente la viabilidad de la línea tumoral HepG2, mostrando porcentajes de viabilidad de 16.84 ± 4.6% hasta 75.79 ± 6.5 % en comparación con el control negativo. Por el contrario, las CMSP no presentaron una reducción significativa en el porcentaje de viabilidad, a excepción de la concentración más alta (88.43 ± 4.30 %). Esta actividad antitumoral mostrada

por el extracto de *P. hysterophorus* podría estar asociada con la presencia de compuestos fenólicos, flavonoides y taninos los cuales sido previamente detectados en el extracto y que han demostrado ejercer propiedades benéficas para la salud³.

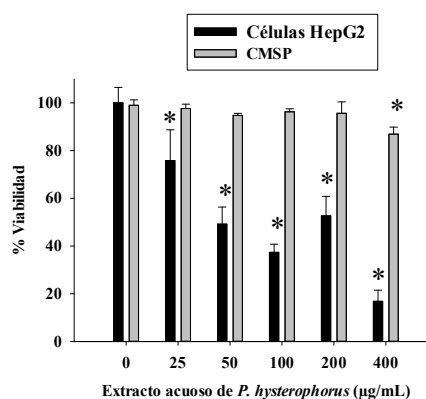


Fig.1 Evaluación del efecto del extracto acuoso de *P. hysterophorus* sobre la viabilidad en la línea tumoral HepG2 y en CMSP (* $p < 0.05$).

Conclusiones

En el presente estudio, el extracto acuoso de *P. hysterophorus* mostró tener un efecto antitumoral sobre la línea celular HepG2 en todas las concentraciones evaluadas, mientras que en las CMSP el extracto no causó una afectación importante.

Agradecimientos

Se agradece al Consejo Nacional de Ciencia y Tecnología (CONACYT) por el financiamiento de la beca nacional (CVU: 999325) a través del Programa de Doctorado en Ciencias en Biotecnología, de la Facultad de Ciencias Químicas, U.A. de C.

Referencias

1. Rébé, C.; Ghiringhelli, F. *Future Oncol.* 2015, 11, 2645 – 2654.
2. Cancer., <https://www.who.int/es/news-room/fact-sheets/detail/cancer#:~:text=Datos%20y%20cifras,colon%20y%20recto%20y%20pr%C3%B3stata>. (Consultado el 19 de agosto de 2022).
3. Alfaro-Jiménez, M.A.; Zugasti-Cruz, A.; Silva-Blemares, S.Y.; Ascacio-Valdés, J.A.; Sierra-Rivera, C.A. *Pharmacogn J.* 2021, 1 - 12.

Trabajos libres cartel áreas de Farmacia

1. Tecnología y análisis farmacéuticos

Incorporación de Principio Activo Anticancerígeno Liposoluble en Micelas Poloxámeras.

Itzel A. Díaz-Rodríguez.

Universidad Autónoma de Nuevo León, San Nicolás de los Garza, Nuevo León, México.
itzelatziiridiaz@gmail.com

Palabras clave: Incorporación, Micelas poloxámeras, sistemas de administración, fenofibrato.

Introducción

Durante los últimos años se han estudiado sistemas de administración de fármacos, en especial dispersiones coloidales como lo son sistemas micelares, así como su importancia para la encapsulación de principios activos liposolubles, permitiendo así mejorar su biodisponibilidad, potencial terapéutico, estabilidad, etc.¹. Las micelas se forman a base de moléculas anfifílicas; la parte hidrofóbica cumple la función de encapsular principios activos de su misma naturaleza (reservorio), y otra parte hidrofílica la cual ayuda a las micelas a permanecer estables en soluciones acuosas².

Este proyecto busca estudiar la eficacia con la cual un principio activo de carácter liposoluble (fenofibrato) puede incorporarse a poloxámeros que cuentan con variables como metodología y concentración.

Metodología

Este proyecto está vinculado con una empresa por lo cual se reservan algunos detalles de las formulaciones y metodología

- Ruta No. 1 Eliminación del solvente.

Disolver el fenofibrato y el Poloxámero a utilizar por separado en sus solventes de conveniencia, para después mezclarlos y agitarlos durante 15 minutos. Terminada la agitación someter a eliminación de solventes por roto-evaporación y a filtración para eliminación de impurezas.

- Ruta No. 2 Hidratación de película delgada.

Disolver el surfactante y el principio activo juntos en un solvente óptimo (no-tóxico), para después provocar la eliminación del solvente por roto-evaporación. Este proceso dará la formación de una película, la cual será llevada a secado por vacío por mínimo 12hrs.

Transcurrido el tiempo necesario hidratar con agua purificada la película para la formación de micelas, por último, filtrar para la eliminación de impurezas.

Resultados y discusión

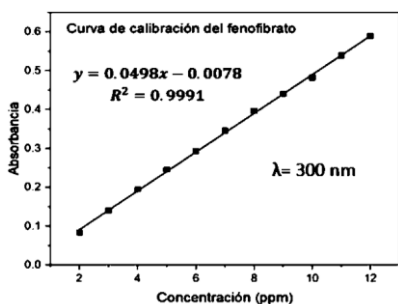
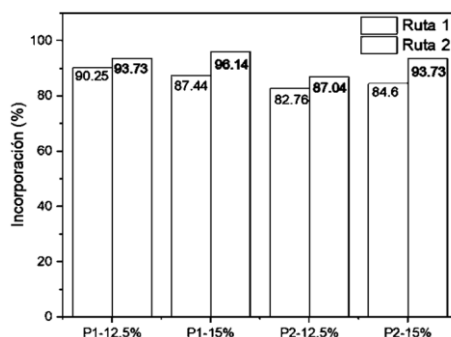


Ilustración 2. Porcentajes de incorporación.

Este gráfico permite observar la eficacia porcentual con la que el principio activo a 2 concentraciones (12% y 14%) logró su incorporación con las rutas establecidas (R1 y R2), en donde se trabajaron con dos tipos de poloxámeros (P1 y P2).

Ilustración 1. Curva de calibración de fenofibrato.

Funge como referencia de confianza ($R^2 = 0.999$) para obtener la ecuación de la recta para cálculos de incorporación.



Para la obtención de los resultados gráficos se tomaron en cuenta factores que pudieran afectar directamente a estos, esto con el fin de minimizarlos en medida de lo posible, es por ello que se trabajó sobre equipo y material que cuenta con certificación de calibración, además, se estudió previamente sobre distintas fuentes bibliográficas las características de importancia para todos los reactivos y analitos utilizados, esto con el fin de establecer una formulación y una metodología ideal para la obtención de resultados eficaces y confiables como se muestra en las Ilustraciones 1 y 2.

Conclusiones

El estudio realizado mostró que se lograron incorporaciones deseables y eficaces del principio activo (fenofibrato) con las variables de concentraciones y de poloxámero, obteniendo mejores resultados para el poloxámero 1 (P1) con la ruta No.2 *Hidratación de la película delgada*, esto con su concentración del 15% (96.14% incorporado).

Estos resultados permiten continuar con análisis posteriores programados para la continuidad del desarrollo del proyecto.

Agradecimientos

Agradezco profundamente y de corazón al CONACyT mediante el CIMAV subsele Monterrey por otorgarme los recursos e instalaciones necesarios para poder realizar mi estancia de investigación.

Así como agradezco infinitamente a Dra. Margarita Sánchez D., M.C. Alejandra Estefanía Herrera A., y M.C. Daniela Fernanda Rodríguez C. por asesorarme, guiarme y enseñarme durante mi trabajo realizado.

Referencias

1. Ahmad, Z.; Shah, A.; Siddiq, M.; and Kraatz, H. B.; P.M. as D.D.V. RSC Adv., 4, no. 33, 17028–17038.
2. Almeida, M.; Magalhães, M.; Veiga, F.; and Figueiras, A., P.P and P.M.: Def. S. and T.A. in C., **2018**, 25, no. 1.
3. Saxena, V.; and Delwar, H., P. 407/TPGS M.M. for D. of G.A. Nanomed., **2012**, 7, 713–721.
4. Chen, L.; Sha, X.; Jiang, X.; Chen, Y.; Ren, Q.; and Fang, X., P.P105/F127 M.M. for the D., Nanomed., **2012**, 8, 73–84.
5. Li, G.; Lu, Y.; Fan, Y.; Ning, Q.; and Li, W., E.O.B. of M.V.M.M. and N., Drug Deliv., **2020**, 27, no. 1, 1010–1017.

Trabajos libres cartel áreas de Farmacia

2. Farmacia clínica, comunitaria y hospitalaria

Percepción del uso de vacunas contra SARS-CoV-2 y sus posibles reacciones adversas

Elizabeth Orozco-Beltrán^{a*}, Elida Marcela Aguilar-Bravo^a

^a Facultad de Ciencias Químicas, Universidad Autónoma de Nuevo León, Avenida Universidad s/n, Cd. Universitaria, San Nicolás de los Garza, Nuevo León, México.

*elizabeth.orozcobl@uanl.edu.mx

Palabras Clave: vacuna, efectos adversos, campaña de vacunación

Introducción

El uso de las vacunas es una estrategia muy útil para la prevención de enfermedades y evitar sufrir las secuelas de las mismas que pueden ser incapacitantes de por vida¹. La aceptación del uso de vacunas es generalmente positiva por la mayoría de la población²⁻³.

En la aparición de la pandemia ocasionada por el virus SARS-CoV-2 en el año 2020, las primeras medidas para prevenir la diseminación de la infección fueron lavado de manos, uso de gel y equipo de protección en el personal de salud.⁴ La infección por virus del SARS-CoV-2 originó muertes y enfermedad a nivel mundial, de tal modo que la industria farmacéutica inició un proceso de fabricación y aprobación en forma muy rápida de la vacuna contra SARS-CoV-2. La aparición de la vacuna contra este virus permitió tener una esperanza para combatir la pandemia y disminuir las muertes ocasionadas por la misma⁵.

El objetivo del presente trabajo es determinar el grado de aceptación del uso de la vacuna contra SARS-CoV-2, así como detectar posibles reacciones adversas con el uso de la misma en una población del área metropolitana de la ciudad de Monterrey.

Metodología

Se realizó la aplicación de una encuesta que constaba de 14 preguntas relativas al uso de la vacuna contra SARS-CoV-2 así como las posibles reacciones adversas derivadas de su aplicación, la cual fue realizada en Forms y enviada por correo electrónico para ser contestada. Se recopiló la información relativa a las respuestas de la encuesta y se obtuvieron los resultados en porcentajes.

Resultados y Discusión

La encuesta fue contestada por 100 personas de las cuáles el 62 % fueron mujeres y el 38 % hombres. El 81.6% de la población encuestada fue vacunada. Las vacunas comúnmente administradas fueron con las marcas de Pfizer, 40 % y Moderna, 28.3 %, los que no aceptaron vacunarse, consideraban que la vacuna podía presentar reacciones adversas. El efecto adverso más comúnmente reportado fue dolor en sitio de inyección en un 35 %, en segundo lugar, malestar general con un 33.3 %.

Del total de las personas encuestadas un 81.6% consideró que era apropiado utilizar la vacuna en niños. Un 86.6 % de los encuestados consideró que el proceso de vacunación contribuyó a disminuir el contagio por el virus y la muerte por la enfermedad.

Conclusión

El uso y aplicación de vacunas ha sido realizada durante muchos años, la aparición de un nuevo virus que ocasionó una pandemia llevó a la elaboración y aprobación en un corto tiempo de una nueva vacuna. La mayoría de los encuestados manifestó que el uso de la vacuna, es una estrategia útil para controlar la pandemia en 86.6 % y aceptaron el uso de la vacuna en un 81.6 %. Algunos encuestados rechazaron su uso por la aparición de efectos adversos⁶. Debido a la naturaleza misma del virus, la industria farmacéutica deberá realizar investigación para lograr una vacuna con alta eficacia contra sus variantes. La inequidad sobre el uso de la vacuna ha sido un tema de interés en los diversos países⁷.

Agradecimientos

Los autores agradecen la participación del grupo de quinto semestre 001 de la licenciatura de QFB.

Referencias

1. Ramos-Rodríguez, A.; Guzmán-Sánchez, M.; Molina-Castro, R.; Bouza-Figueroa, J., *Vacci Monitor* 2020, 29(2), 68-74.
2. Luzuriaga, J. P.; Marsico, F.; García, E.; González, V.; Kreplak, N.; Pifano, M.; González, S. *SciELO Preprints*. <https://doi.org/10.1590/SciELOPreprints.2068>.
3. Díaz-Quiñones, J. A. *Gac. Med. Mex* 2021, 157: 125-126.
4. Urbiztondo, L.; Borrás, E.; Miranda, J. *Vac*, 2020, 21(1), 6972.
5. Álvarez-Collado, L.; Castiñeiras-Ortega, M.; González-Contreras, F.; González-de Abreu, J.M.; Casma-López, R.M.; Núñez-López, M.C. *Rev Asoc Esp Espec Med Trab*, 2021, 30, 217.228.
6. Becker, S.; Balbuena, C.; Samudio, M. *Rev. cient. cien. salud*. 2021, 3 (2), 85-94.
7. Casas, I.; Mena, G. *Rev Med Clín* 156, 2021, 500-502.

Actividades del farmacéutico en la pandemia por SARS-CoV-2

Elizabeth Orozco-Beltrán^{a*}, Elida Marcela Aguilar-Bravo^a

^aFacultad de Ciencias Químicas, Universidad Autónoma de Nuevo León, Avenida Universidad s/n, Cd. Universitaria, San Nicolás de los Garza, Nuevo León, México

*elizabeth.orozcobl@uanl.edu.mx

Palabras Clave: Atención Farmacéutica, pandemia, actividad farmacéutica, farmacia comunitaria, farmacia hospitalaria.

Introducción

Las actividades de los farmacéuticos tanto en el área comunitaria como hospitalaria son variadas, incluyendo aquellas que requieren atención personalizada con los pacientes. La aparición de una pandemia a nivel mundial ocasionó un cambio en dichas actividades¹⁻².

Para realizarlas no era posible un contacto personal debido al riesgo del contagio de la enfermedad viral, sobre todo en la población de adultos mayores que son los que requieren una atención farmacéutica especializada debido a la polifarmacia y enfermedades crónicas concomitantes que necesitan atención continua de parte del equipo de salud. Elaborar nuevas estrategias para ofrecer asesoría farmacéutica a pacientes externos surge entonces como una necesidad en los tiempos presentes y futuros³⁻⁴.

El objetivo del presente trabajo es realizar una revisión bibliográfica de artículos científicos para determinar las actividades realizadas por los farmacéuticos en la pandemia de SARS-CoV-2 y las estrategias utilizadas para proporcionar atención farmacéutica tanto en el ámbito comunitario como hospitalario.

Metodología

Se realizó una búsqueda de artículos en bases de datos especializadas referentes a las actividades realizadas en la pandemia por los farmacéuticos en diferentes países, se obtuvieron 30 artículos los cuales fueron revisados con el fin de obtener la información pertinente.

Resultados y discusión

El 50 % de los artículos revisados correspondía a España, China y Estados Unidos de América en proporción igual. Dicha revisión permitió obtener la información de que los farmacéuticos debieron adaptarse a las condiciones de la pandemia realizar su trabajo de educador para la salud, así como de asesoría farmacéutica en forma remota para los pacientes que presentaban enfermedades crónicas y agudas utilizando medios electrónicos, así como desarrollar estrategias para realizar la dispensación en los domicilios. Se describió la necesidad de realizar protocolos para la entrega de medicamentos y seguimien-

to farmacoterapéutico a pacientes externos a distancia. Se descubrieron también las barreras que se presentaban en esta nueva estrategia que incluyen la necesidad de capacitación al personal de salud, así como la falta de destreza en el uso de la tecnología o bien la falta de equipo requerido para recibirla por parte de los pacientes.

Conclusiones

Las actividades de los farmacéuticos tuvieron que sufrir modificaciones y se buscaron estrategias que permitieron dar la asesoría y resolver todas las dudas de los pacientes en el período de tiempo correcto de acuerdo a las necesidades de cada paciente usando la tecnología disponible⁵⁻⁶. Se presentaron algunas barreras como la dificultad de usar medios no tradicionales para obtener la asesoría farmacéutica sobre todo en pacientes de edad avanzada y con múltiples comorbilidades, así como la necesidad de dar preparación al personal de salud en el uso de las mismas, para proporcionar asesoría farmacéutica con el objetivo de lograr una terapia exitosa, tanto en pacientes agudos como crónicos, sin exponerlos al contagio, lo que permitió superar las barreras que se presentaron⁷⁻⁸.

Referencias

1. Gómez, Luch M.T. Rev. OFIL-ILAPHAR 2020, 30, 4:361
2. Razai, S; Doerholt, K.; Ladhani, S.; Oakeshott P. BMJ 2020, 368 :800.
3. Elbeddini, A.; Prabakaran T.; Almasalkhi, S.; Tran, C. J. Pharm Policy Pract. 2020, 19;13:36.
4. Díaz, E.; Amézaga, R.; Menéndez, B; Cortés, V.; Escapa, M.; Suberviola, B.; Serrano, L; Marcos, N; Quintana, M; Catalán, M. Med Intensiva 45. 2021, 104-121.
5. Ghibu, S.; Juncan A.M.; Rus L.L.; Frum, A.; Dobrea, C. M.; Chiş A.A.; Gligor F.G.; Morgovan, C. Int J Environ Res Public Health., 2021 Sep 16;18(18):9776.
6. Salar, L. Farm Com 2020, 12(2), 3-4.
7. Ung, C. Res Soc Admin Pharm, 2020, 16, 583-586.
8. Liu, S.; Luo, P.; Tang, M.; Hu, Q.; Polidoro, J. P.; Sun, S.; Gong, Z. Int J Clin Pharm, 2020, 42(2), 299-30.

Aceptación del uso de medios electrónicos para recibir asesoría farmacéutica y de salud

Elizabeth Orozco-Beltrán^{a*}, Elida Marcela Aguilar Bravo^a

^aFacultad de Ciencias Químicas, Universidad Autónoma de Nuevo León, Av. Universidad s/n, Cd. Universitaria, San Nicolás de los Garza, México

*elizabeth.orozcobl@uanl.edu.mx

Palabras Clave: pandemia, asesoría farmacéutica, medios electrónicos

Introducción

Al inicio de la pandemia ocasionada por el virus SARS-CoV-2 las primeras medidas para evitar la diseminación de la infección fueron el lavado de manos y la utilización de gel desinfectante, se ocasionó enfermedad y muerte a nivel mundial y se procedió al distanciamiento social lo cual dificultó que los pacientes recibieran asesoría farmacéutica presencial y de salud¹. Para superar estas barreras los integrantes del equipo de salud se dispusieron a crear estrategias para proporcionar a cada paciente la atención requerida y con ello se incrementó el uso de medios electrónicos²⁻³.

El objetivo del trabajo fue determinar el grado de aceptación del uso de medios electrónicos para obtener asesoría farmacéutica y de salud, así como identificar cuáles serían las ventajas y desventajas de dichos medios.

Metodología

Se elaboró y aplicó una encuesta, durante los meses de junio, julio y agosto del año 2022, que constaba de 14 preguntas relativas al uso de medios electrónicos para obtener asesoría farmacéutica y de salud, la cual fue realizada en Forms y enviada por correo electrónico para ser contestada. Se recopiló la información obtenida a través de las respuestas de la encuesta y se obtuvieron los resultados en porcentajes.

Resultados y discusión

Se aplicaron 80 encuestas a personas en diversas ciudades del área metropolitana de Monterrey, la cual fue contestada por 67.5 % mujeres y 32.5 % hombres. Un 72.5 % de los encuestados correspondían al rango de edad de 17 a 37 años y un 20% al de 30 a 57 años, el resto, un 7.5 %, fueron mayores de 58 años. La mayoría de los encuestados, un 93 %, consideraron que fue adecuado utilizar los medios electrónicos durante la pandemia y lo hicieron para obtener información tanto de la infección por SARS-CoV-2 (35 %) así como los medicamentos que pudieran ser utilizados para su tratamiento (40 %).

La mayoría de ellos opinaron que las redes sociales fueron un medio útil para obtener información y que en

su centro de atención médica se utilizaron medios electrónicos (63 %). Un 95 % considera que se debería continuar con el uso de medios electrónicos para dar asesoría farmacéutica y de salud. Una desventaja detectada fue la falta de pericia para el uso de dichos medios sobre todo en personas de edad avanzada. El sistema de salud desarrolló estrategias para dar asesoría a través de esta tecnología, la mayoría de los encuestados encontró esta herramienta muy útil para el tiempo presente y futuro⁴⁻⁵.

Conclusiones

La asesoría farmacéutica y el seguimiento farmacoterapéutico se ofrece en forma presencial pero debido a la pandemia por SARS-CoV-2 se requirió el aislamiento social, el uso de medio electrónicos para realizar estas funciones se convirtió en una herramienta útil, concluyendo a través de los resultados de las encuestas que el uso de la telefarmacia resultó ser ampliamente aceptado por la población del área metropolitana de Monterrey que fue encuestada.

Agradecimientos

Los autores agradecen la participación de los grupos de los semestres octavo 002 y séptimo 004 de la licenciatura de QFB por su apoyo para aplicar las encuestas.

Referencias

1. Tortajada-Goitia, B.; Morillo-Verdugo, R.; Margusiño-Framiñán, L.; Marcos, J.A.; Fernández-Llamazares, C.M. *Farm Hosp.* 2020, 44(4), 135-140.
2. Rivas-Rodríguez, M.D.; Medina-Comas, R.M.; Ferris-Villanueva, M.; González-Vaquero, D.; Rangel-Mayoral, J.F. *Eur J Hos Pharm.* 2021, 28 (Supl 1).
3. Ibrahim, O.; Ibrahim, R.M.; Abdel, O.H.; Mezlamani, A.Z.; Al Mazrouei, N. *Telemed, J E Health.* 2021. 27(6), 649-656.
4. Patel, S.; Ganon, A.; Donald, C.; McCarthy, G. *Am J Geriatr Psychiatry.* 2020, 28 (9), 1009-1011.
5. Margusiño-Framiñán, L.; Illaro-Uranga, A.; Lorenzo-Lorenzo, K. *Pharm Hosp.* 2020, 44, 61-65.

Trabajos libres cartel áreas de Farmacia

4. Farmacología y toxicología

Inyección intravenosa de mercurio metálico en un pie

Jenifer Hernández-Martínez, María de Lourdes Chávez-Briones, Adriana Ancer-Arellano, Gilberto Jaramillo-Rangel, Marta Ortega Martínez*

Departamento de Patología, Facultad de Medicina, Universidad Autónoma de Nuevo León, Ave. Madero y Dr. Eduardo Aguirre Pequeño, Colonia Mitras Centro, CP 64460, Monterrey, Nuevo León, México.

*martaortega69@yahoo.com.mx

Palabras clave: mercurio metálico, inyección intravenosa, pie

Introducción

El mercurio es el único metal que es líquido a temperatura ambiente. Los eventos de inyección intravenosa de mercurio metálico son raros, y se han reportado principalmente asociados a inyecciones accidentales, intentos de suicidio, e intentos de personas adictas a las drogas de experimentar nuevas formas de intoxicación¹. El mercurio metálico es químicamente estable y puede permanecer por mucho tiempo dentro del organismo sin causar daño aparente. Solamente en muy pocos casos se ha considerado a la inyección intravenosa de mercurio metálico como la causa directa de muerte de un individuo. El objetivo de este trabajo es reportar un caso de muerte provocada por la inyección intravenosa de mercurio metálico en un pie.

Metodología

Varón de 32 años encontrado muerto en centro penitenciario ubicado en Monterrey, México. Presentó una punción venosa en parte interna del dorso del pie izquierdo. Se realizó una radiografía de la zona de interés, y se removió un líquido plateado presente en los vasos de dicha zona. Se llevaron a cabo análisis toxicológicos de sangre, contenido gástrico y lavados vesicales, y se realizó una autopsia y análisis histopatológicos.

Resultados y discusión

La radiografía mostró opacidades metálicas en la luz de la vena safena mayor y algunas de sus tributarias. El líquido removido fue identificado como mercurio metálico. Los análisis toxicológicos fueron negativos para alcohol y drogas de abuso. La autopsia y los análisis histopatológicos descartaron embolia gaseosa, y mostraron principalmente congestión de órganos internos; la causa de muerte fue declarada como embolismo cardiopulmonar secundario a émbolo de mercurio.

Los casos más graves de toxicidad por mercurio ocurren secundariamente a la inhalación de sus vapores o a la ingestión de

sus sales inorgánicas^{2,3}. El efecto de una inyección con mercurio metálico podría depender de factores como el sitio de entrada y la cantidad inyectada, pudiendo causar una amplia variedad de consecuencias, desde la ausencia total de síntomas, hasta la muerte. En contraste con nuestros hallazgos, en reportes previos en los cuales la inyección intravenosa de mercurio metálico fue considerada como la causa directa de muerte, se detectó mercurio en órganos como riñón e hígado, y en fluidos biológicos como sangre, orina, y líquido bronquioalveolar⁴⁻⁶. Sin embargo, en esos casos hubo otras vías de exposición al mercurio metálico (ingestión⁴ o inhalación de vapores⁶) o exposición a otras sustancias tóxicas (meperidina y cianuro de sodio⁵). Por lo tanto, es posible que estemos describiendo por primera vez los hallazgos encontrados en la muerte causada exclusivamente por inyección intravenosa de mercurio metálico.

Conclusiones

Reportamos un caso de muerte por embolismo cardiopulmonar secundario a la inyección intravenosa de mercurio metálico en un pie.

Referencias

1. Da Broi, U.; Moreschi, C.; Colatutto, A.; Marcon, B.; Zago, S. J. *Forensic Leg. Med.* **2017**, 50, 12-19.
2. Lu, Q.; Liu, Z.; Chen X. *Medicine (Baltimore)* **2017**, 96, E8643.
3. Chary, R.; Sneha, L.; Vishnukanth, G.; Manju R. *Adv. Respir. Med.* **2020**, 88, 157-159.
4. De Palma, G.; Mariotti, O.; Lonati, D.; Goldoni, M.; Catalani, S.; Mutti, A.; Locatelli, C.; Apostoli, P. *Clin. Toxicol. (Phila)* **2008**, 46, 869-876.
5. Yan, P.; Huang, G.; Li, D.; Li, L. *Am. J. Forensic Med. Pathol.* **2012**, 33, 273-275.
6. Alhamad, T.; Rooney, J.; Nwosu, A.; Maccombs, J.; Kim, Y.S.; Shukla, V. *Int. Urol. Nephrol.* **2012**, 44, 647-651.

Evaluación de la neurotoxicidad del extracto metanólico de *Oenothera rosea* en la línea celular PC12

Kevin Leonardo López-Simental^a, Mónica Azucena Ramírez-Cabrera^{a*}, Omar González-Santiago^a, Juan Manuel J. Favela-Hernández^b, Eder Ubaldo Arredondo-Espinosa^a

^a Universidad Autónoma de Nuevo León, Facultad de Ciencias Químicas, Pedro de Alba s/n, San Nicolás de los Garza, México.

^b Universidad Juárez del Estado de Durango, Av. Artículo 123 S/N, Col. Filadelfia, Gómez Palacio, Durango, Mexico

*E-mail de autor responsable. monica.ramirezcbr@uanl.edu.mx

Palabras clave: *Oenothera rosea*, extracto metanólico, neurotoxicidad, *in vit*

Introducción

Oenothera rosea L'Hér. ex Aiton conocida comúnmente en México como hierba del golpe, ha sido utilizada en la medicina tradicional desde la época de los pueblos Nahuas para tratar una gran variedad de padecimientos. Además, ya se ha reportado que el extracto metanólico de las hojas de esta planta posee actividad antiinflamatoria, antibacteriana, antioxidante, anticancerígena, así como efecto antiagregante plaquetario e hipolipemiente¹. Sin embargo, la información sobre la toxicidad es escasa, por lo cual, es importante realizar ensayos de citotoxicidad si se considera usarlo como parte de un tratamiento terapéutico. Particularmente en líneas neuronales no hay estudios de neurotoxicidad, los cuales son necesarios demostrar su seguridad, pues algunas de las moléculas presentes en los extractos pudieran llegar al sistema nervioso central. El objetivo de este trabajo fue establecer la seguridad del extracto metanólico de hojas de *Oenothera rosea* en la línea celular PC12.

Metodología

El extracto fue obtenido de las hojas de esta planta con número deoucher: HJAAA_04_2022_0002, éste se obtuvo por maceración en metanol a 25°C por 48 horas en agitación, después fue secado en rotavapor para finalmente preparar una solución stock en DMSO (10,000µg/mL). El ensayo de neurotoxicidad se realizó en la línea celular PC12 (modelo neuronal) mediante la técnica de MTT, en placas de 96 pocillos en las cuales se colocaron 10,000 células por pocillo y se incubaron por 24 horas a 37°C con una atmósfera con 95% de CO₂. Una vez pasado este tiempo y formada la monocapa se colocó el extracto metanólico en un rango de concentración de 100 a 3.125µg/mL, se incluyó glutamato a 80mM como control positivo de muerte celular y células sin tratamiento como control negativo, se incubó la placa por 24 horas a las mismas condiciones, se retiró el medio y se hizo un lavado con PBS, después se añadió la solución de MTT (0.5mg/mL), se incubó 3h, se retiró nuevamente el medio y posteriormente se añadieron 200 µL de alcohol isopropílico acidificado y se dejó en oscuridad a temperatura ambiente por 30 minutos y finalmente se leyó en un lector de microplacas a 570 nm².

Resultados y discusión

Las concentraciones que ocasionaron más muerte celular fueron las de 100 y 50 µg/mL, con porcentajes de viabilidad de 82.49 ± 5.44% y 87.48 ± 5.61% respectivamente, las concentraciones de 25 a 3.125 µg/mL se mantuvieron por arriba de 93% En un análisis de varianza (ANOVA) con prueba de Dunnet, se estableció que a

partir de las concentraciones de 50 y 100 µg/mL hay diferencia significativa en comparación con el control (células sin tratamiento), en el caso de las concentraciones de 25 a 3.125 µg/mL no se observó diferencia significativa ($p < 0.0001$) (fig.1). En los ensayos *in vitro* encontrados en la bibliografía se menciona que el extracto metanólico de esta planta cuenta con actividades farmacológicas a concentraciones por debajo de los 50 µg/mL, teniendo en cuenta los resultados obtenidos, estas concentraciones no generan neurotoxicidad considerable en la línea celular utilizada⁴.

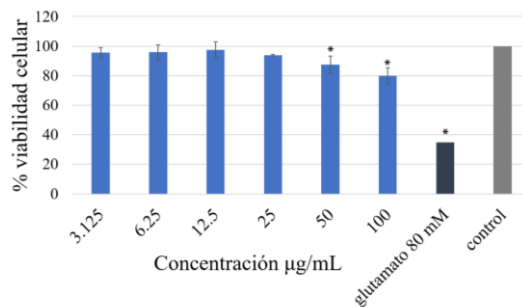


Fig 1. Ensayo de viabilidad celular del extracto metanólico de *Oenothera rosea* mediante la técnica de MTT. * $p < 0.0001$

Conclusiones

El extracto metanólico de hojas de *Oenothera rosea* no mostró toxicidad considerable a las concentraciones por debajo de 50 µg/mL, en la línea celular PC12. Además, se podrían realizar ensayos a concentraciones menores, para evaluar si cuenta con actividad farmacológica sobre enfermedades del sistema nervioso central sin provocar daños en éste.

Agradecimientos

A CONACyT por la beca otorgada. Apoyos PAICYT 202-CS-2022 y 260-CE-2022.

Referencias

- Márquez-Flores, Y. K.; Meléndez-Camargo, M. E.; García Mateos, N. J.; Huerta-Anaya, M. C.; Pablo-Pérez, S. S.; Silva Torres, R. *Phytochemical South African J. Bot.* 2018, 116, 245-250.
- Mosmann, T. J. *Immunological Methods.* 1983, 65 (83), 55-63.
- Chirinos, R.; Pedreschi, R.; Rogez, H.; Larondelle, Y.; Campos, D. *Ind. Crops Prod.* 2013, 47, 14

Trabajos libres cartel áreas de Farmacia

5. Productos naturales y sintéticos con actividad biológica

Bioprospección de actinobacterias de la ciénaga de Sisal, Yucatán

Carlos D. Hernández-Granillo^a, Alejandra prieto-Davó^b, Mario Figueroa^{a*}

^aDepartamento de Farmacia, Facultad de Química, Universidad Nacional Autónoma de México, Coyoacán, CDMX, 04510, México. ^bUnidad de Química SISAL, Facultad de Química, Universidad Nacional Autónoma de México, Sisal, Yucatán, 97356, México.

*mafiquer@unam.mx

Palabras clave: Actinobacterias, antimicrobianos, productos naturales, metabolómica.

Introducción

Los ecosistemas acuáticos son extremadamente complejos y contienen una gran diversidad de formas de vida. Dentro de éstos, la composición química del agua y la disponibilidad variable de nutrientes, han causado que los organismos que los habitan desarrollen mecanismos de defensa química muy avanzados¹. Es por lo anterior y por la gran diversidad de microorganismos de la península de Yucatán que este trabajo busca explorar su potencial químico en busca de nuevas entidades químicas con potencial antimicrobiano².

Metodología

Las bacterias fueron proporcionadas por la Dra. Alejandra Davó, investigadora de la Unidad de Química-Sisal, FQ, UNAM. Fueron aisladas de distintos cenotes en la Reserva Estatal Geohidrológica Anillo de Cenotes (REGAC).

Cultivo, identificación y extracción: Se eligieron 9 bacterias del consorcio proporcionado y se cultivaron en 0.5 L de medio ISP2 y DSC -ASW por 7 días a 120 rpm, TA y fotoperiodos 12/12 h. Los extractos de la biomasa y el sobrenadante de cada bacteria se obtuvieron con AcOEt y MeOH, respectivamente. La identificación de las bacterias se realizó mediante el análisis la región 16S ARNr.

Actividad antimicrobiana: Los 72 extractos obtenidos se sometieron a un ensayo de actividad antimicrobiana contra una serie de bacterias patógenas del grupo ESKAPE (*E. faecalis*, *S. aureus*, *K. pneumoniae*, *K. aerogenes*, *A. baumannii*, *P. aeruginosa*, *E. cloacae*). Las concentraciones de prueba fueron 20 y 200 µg/mL y se empleó el MTT como agente revelador. Los organismos más activos se cultivaron en mediana escala (20×).

Fraccionamiento y purificación: Los extractos en mediana escala se fraccionaron mediante cromatografía de tipo flash o mediante SPE, empleando mezclas entre H₂O-MeOH-acetona en pasos de polaridad decreciente. Las fracciones obtenidas se evaluaron en el mismo ensayo antes descrito y se purificaron aquellas de mayor actividad mediante HPLC a nivel preparativo (C₁₈) o por cromatografía de columna abierta (Si-gel).

Caracterización de los compuestos puros: Los compuestos aislados fueron caracterizados mediante el análisis de sus espectros de HRMS y de RMN mono y bidimensionales.

Estudios de metabolómica. A partir de los datos de UPLC-PDA-HRESIMS-MS/MS de los extractos de las 3 bacterias seleccionadas, se realizó el análisis metabolómico por redes moleculares empleando la plataforma GNPS y las herramientas Derreplicator+ y MolNetEnhancer.

Resultados y discusión

De los 72 extractos obtenidos de las 9 bacterias de prueba, tres mostraron actividad de inhibición total a alguna de las concentraciones de prueba contra *S. aureus* resistente y sensible a metilicina (MRSA y MSSA) y a *E. faecalis*. Estos organismos fueron identificados como actinobacterias pertenecientes a los géneros *Glutamicibacter* (G) *Streptomyces* (S) y *Nocardiosis* (N)

(Figura 1). A partir de las fracciones activas de los extractos en mediana escala del organismo G, se aislaron los ácidos cólicos 1-4 (Figura 1). De las actinobacterias S y N se aislaron otros metabolitos cuya estructura molecular se encuentran en proceso de caracterización. Finalmente, el análisis metabolómico por de redes moleculares de las bacterias G y S reveló estos organismos contienen numerosos compuestos de naturaleza lipídica, aminoácidos, ácidos mono-, bi- y tetra-carboxílicos, fenilpropanoides, policétidos, entre otros metabolitos previamente reportados³.

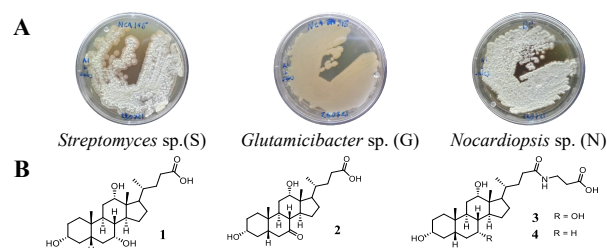


Fig. 1 (A) Bacterias de estudio. **(B)** Compuestos aislados de la actinobacteria G.

Conclusiones

El estudio químico de los extractos activos contra patógenos del grupo ESKAPE de tres actinobacterias aisladas de cenotes en la REGAC, permitió identificar cuatro ácidos cólicos mayoritarios de presencia inédita en este tipo de organismos, además de otros compuestos bioactivos que se encuentran en proceso de caracterización. La investigación bibliográfica sugiere que este es el primer reporte de *Glutamicibacter* sp. como bacteria con potencial antimicrobiano. Por otra parte, los análisis metabolómicos por redes moleculares permitieron conocer la diversidad química de los metabolitos secundarios producidos por estas bacterias, y que está en armonía con el potencial de las actinobacterias para producir entidades químicas con potencial antimicrobiano.

Agradecimientos

MF agradece el financiamiento otorgado por la UNAM DGAPA-PAPIIT IN222220 y la FQ-PAIP 5000-9145 para la realización de este proyecto. CDHG agradece al CONACyT por la beca otorgada para los estudios de posgrado (no. 1059306).

Referencias

- Hagström, Å.; Pommier, T.; Rohwer, et al. *Appl. Environ. Microbiol.* **2002**, *68* (7), 3628–3633.
- Fajardo-Hernández, C. A.; Khan, F. S. T.; Flores-Bocanegra, L. et al. *ACS Omega* **2022**, *7* (14), 12171–12185.
- Crevelin, E. J.; Crotti, A. E. M.; Zucchi, T. D. et al. *J. Mass Spectrom.* **2014**, *49* (11), 1117–1126.

Análisis del efecto antioxidante en extractos de brotes de amaranto elicitados con metil jasmonato

Alejandro Abraham Ayala Quezada ^a, Karla Ramirez Estrada ^{a*}

^aLaboratorio de Metabolismo Celular, Centro de Laboratorios Especializados (CELAES). Facultad de Ciencias Químicas. Universidad Autónoma de Nuevo León, Pedro de Alba S/N, Niños Héroes, Ciudad Universitaria, San Nicolás de los Garza, N.L. México

* karla.ramirezst@uanl.edu.mx

Palabras clave: Actividad antioxidante, brotes, amaranto, elicitación

Introducción

El amaranto fue un cultivo alimenticio importante en las culturas mesoamericanas. Esta planta ha sido calificada como uno de los cultivos más prometedores del mundo e identificado como un cultivo de potencial importancia ¹.

El amaranto posee grandes cantidades de nutrientes; además, contiene fitoquímicos o metabolitos secundarios que potencialmente ayudan a prevenir cierto tipo de enfermedades y pueden mejorar la salud humana, por ejemplo, los compuestos fenólicos, ya que poseen excelentes propiedades antioxidantes ².

Se han estudiado diferentes técnicas para mejorar y aumentar la producción de metabolitos secundarios, siendo la elicitación la estrategia más factible para aumentar la producción de dichas moléculas ⁵⁻⁶. El metil jasmonato es uno de los elicitores con mejores resultados en el incremento del metabolismo secundario vegetal. El presente trabajo tiene como objetivo es analizar los efectos de la elicitación en la actividad antioxidante en extractos metanólicos de brotes de amaranto. Esto se hará por medio de la elicitación de los brotes utilizando metil jasmonato (MeJa) como elicitor.

Metodología

Semillas de *Amaranthus spp* se dividieron en 3 grupos, se esterilizaron superficialmente con etanol al 70% e hipoclorito de sodio (NaClO) al 1%. Se rociaron con agua estéril cada 12 h durante 4 días. Posteriormente durante 3 días consecutivos se rociaron los grupos 1 y 2 con 20 mL de MeJa 100 y 200 μ M, respectivamente.

Los brotes se recolectaron y liofilizaron para obtener material vegetal seco, éste se trituró y se mezcló con metanol 99.9%, se agitó por 24 h a temperatura ambiente. Una vez pasado ese tiempo los extractos se filtraron y se eliminó el solvente en un rotaevaporador.

El contenido fenólico total (CFT) de los extractos se determinó utilizando el ensayo de Folin-Ciocalteu ⁷ y la capacidad antioxidante se midió utilizando el ensayo de 2,2-difenil-1-picrilhidrazilo (DPPH) utilizando ácido gálico como control positivo ⁸.

Resultados y discusión

De acuerdo en el análisis estadístico, no hubo diferencia significativa en el contenido fenólico total entre el grupo control y los grupos tratados. Los datos obtenidos en la concentración de fenoles totales se compararon con datos reportados en la literatura, un estudio realizado en brotes de amaranto donde se analizó su contenido fenólico en diferentes etapas de crecimiento reportó que, durante la etapa de brotes, las concentraciones de fenoles variaban de 18 a 33 mg EAG/g extracto ⁹, nuestra investigación reportó valores entre 21 a 23 mg EAG/g extracto. De igual manera, no encontramos diferencias significativas entre los grupos en cuanto a la actividad antioxidante de los extractos metanólicos obtenidos de los brotes; los valores EC50 obtenidos dieron

concentraciones entre 26 a 29 mg/mL, no se hallaron investigaciones previas con resultados que se puedan comparar con los obtenidos en el presente proyecto.

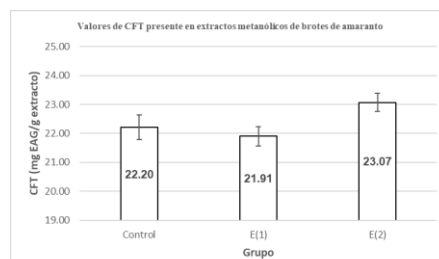


Figura 1. Contenido fenólico total (CFT) expresado en mg de equivalentes de ácido gálico (GAE) por g extracto de cada grupo. Control, E(1); MeJa 100 μ M, E(2); MeJa 200 μ M

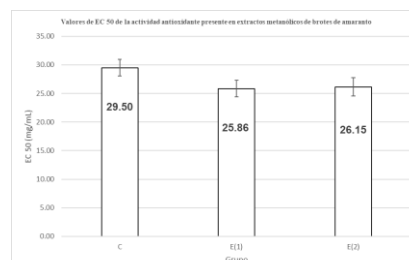


Figura 2. Comparación de los EC 50 de la actividad antioxidante de los extractos metanólicos obtenidos de los brotes de amaranto tratados y sin tratar. C; control, E(1); MeJa 100 μ M, E(2); MeJa200 μ M

Conclusiones

Los resultados obtenidos muestran que en nuestras condiciones de elicitación y extracción, el MeJa no resultó ser efectivo para enriquecer los brotes de amaranto en fitoquímicos fenólicos, ni aumentar la actividad antioxidante en el extracto metanólico. Es necesario realizar más estudios para encontrar las condiciones adecuadas de elicitación y extracción para encontrar un efecto positivo.

Referencias

1. Pavlik, K. Neuro Endocrinol Lett. 2012, 33, 3-7
2. Kumara, K.; Kumar, B. A. Nat Prod Chem Res. 2018, 06 (05)
3. Adegbola, P. I.; Olaniyi, T. D. S Afr J Bot. 2020, 133, 111-117
4. Mishra, K.; Ojha, H.; Chaudhury, N. K. Food Chem 2012, 130, 1036-1043
5. Venskutonis, P.; Kraujalis, P. Food science and food safety 2013, 12, 381-412
6. Karamać, M.; Gai, F.; Longato, E.; Meineri, G.; Janiak, M. A.; Amarowicz, R.; et. Al. Antioxidants 2019, 8, 173-180
7. Ainsworth, E. A.; Gillespie, K. M. Nat Protoc. 2007, 2, 875-877
8. Guan, Y.; Hu, W.; Jiang, A.; Xu, Y.; Sa, R.; Feng, K.; et. Al. Mol. 2019, 2
9. Adegbola, P.I; Adetutu, A.; Olaniyi, T.D. S Afr J Bot. 2020, 133, 111-117

Efecto de la elicitación con metil jasmonato en la actividad antioxidante del extracto metanólico de *Coleus hadiensis*

José Abraham Recendiz-Cerda^a, Ana Mariel Torres-Contreras^a Karla Ramírez-Estrada^{a*}

^a Laboratorio de Metabolismo Celular, Centro de Laboratorios Especializados (CELAES). Facultad de Ciencias Químicas. Universidad Autónoma de Nuevo León, Pedro de Alba S/N, Niños Héroes, Ciudad Universitaria, San Nicolás de los Garza, N.L. México.

*E-mail de autor responsable. karla.ramirezst@uanl.edu.mx

Palabras clave: *Lamiaceae*, actividad antioxidante, metabolitos secundarios, elicitación.

Introducción

Las plantas han sido y son de gran importancia para la salud humana, ya que poseen moléculas con diversas actividades biológicas. La actividad antioxidante es una de las más importantes pues ayuda a prevenir diversos tipos de enfermedades crónicas.¹

Muchas de las enfermedades actuales son causadas por estrés oxidativo celular, tales como el cáncer, Alzheimer, incluso el envejecimiento prematuro de la piel está relacionado con este tipo de estrés. Los metabolitos secundarios vegetales con actividad antioxidante pueden inactivar los radicales libres, que se generan en el estrés oxidativo celular, y ayudar a evitar el desarrollo de ciertas enfermedades.² Dada la importancia de estos compuestos de origen vegetal, actualmente se estudia la manera de aumentar su biosíntesis dentro de la planta. Uno de los métodos más eficaces es la elicitación, siendo el metil jasmonato (MeJA) uno de los mejores elicitores. En el proceso de elicitación se adiciona a las plantas fitohormonas (como el MeJA) u otro tipo de elicitores (toxinas, lisados de patógenos, etc). Estos mimetizan el estrés medio ambiental, e inducen la biosíntesis de metabolitos secundarios en el organismo vegetal.³

La familia *Lamiaceae* posee plantas ricas en metabolitos secundarios antioxidantes, además se ha documentado que presenta una buena respuesta a la elicitación con MeJA. Una de las plantas de esta familia es *C. hadiensis*, comúnmente llamada planta del vick⁴

El objetivo de este trabajo es evaluar el efecto de la elicitación con MeJA en la actividad antioxidante del extracto metanólico de *C. hadiensis*.

Metodología

Un grupo de 4 plantas de *C. hadiensis* de 7 semanas de vida, crecidas bajo condiciones de día largo (16h luz / 8h oscuridad), se sometieron al tratamiento de elicitación con MeJA 100 µM. Se rocío foliarmente dicho compuesto dos veces a la semana durante 24 días.

Los extractos metanólicos de plantas control y elicitadas se obtuvieron macerando las partes aéreas de las plantas en metanol al 99.9%. A dichos extractos se les realizó el tamizaje fitoquímico.⁵ La cuantificación de fenoles totales se realizó mediante el método Folin y el análisis de la actividad antioxidante por el método de DPPH, para este último análisis se utilizó el reactivo DPPH como control negativo y el ácido ascórbico como control positivo. Los resultados experimentales fueron sometidos a un tratamiento estadístico.

Resultados y discusión

Los extractos de ambos grupos dieron positivo a la presencia de compuestos fenólicos, alcaloides, esteroides y cumarinas.

En la cuantificación de fenoles totales, se observó un incremento de en la concentración de compuestos fenólicos en los extractos elicitados en comparación de los extractos control (Figura 1).

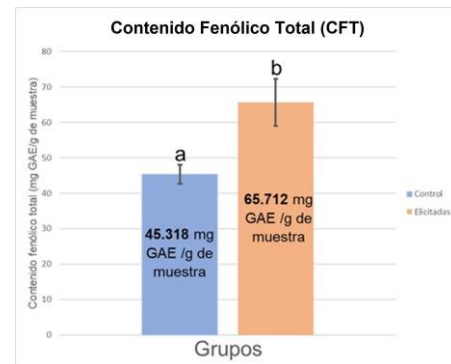


Figura 1. Análisis cuantitativo del contenido fenólico total en los extractos control y elicitados con MeJA. Expresado en equivalentes de ácido gálico (GAE). Las diferentes letras indican una diferencia significativa entre muestras.

Los extractos provenientes de plantas elicitadas exhibieron un mayor efecto antioxidante. Observamos un EC₅₀ de 769 µg/mL en las plantas elicitadas y un valor de EC₅₀ del grupo control de 1050 µg/mL.

Los resultados de este proyecto sirven como base en la comunidad científica para futuros estudios con esta planta ya que en la literatura no hay información sobre el efecto del MeJA en *C. hadiensis*.

Conclusiones

En base a los resultados experimentales obtenidos, se puede decir de manera concreta que el MeJA influye positivamente en el metabolismo de fenoles en *Coleus hadiensis* aumentando su producción. Por tanto, se observó un incremento en la actividad antioxidante, derivada de estos compuestos, en los extractos metanólicos de las plantas elicitadas.

Referencias

1. Seca, A.; Pinto, D. *IJAS*. **2018**, 19, 1-22.
2. Diniz do Nascimento, L.; Barbosa de Moraes, A.A.; Santana da Costa, K.; Pereira Galucio, J.M.; Tube, P.S.; Leal Costa C.M.; Neves Cruz, J.; de Aguilar Andrade, E.H.; Guerreiro de Faria, L. *Biom*. **2020**, 10, 1-35.
3. Namdeo, A.G. *PHCOG REV*. **2007**, 1, 69-79.
4. Rajesh, A.; Sathasivampillai, S.V.; Rajamanoharan, P.R.S. *IJSL*. **2021**, 3, 65-72.
5. Menon, B. D.; Sasikumar, J. M.; Latha, K. *IJNPR*. **2012**, 3, 359-365
- Thangaraj, P. *PAPBNP* **2015**, 49-55.

Trabajos libres cartel áreas de Farmacia

6. Química computacional

Cribado virtual basado en farmacóforo para la identificación de potenciales inhibidores de la proteína Mpro del SARS-CoV-2

Timoteo Delgado-Maldonado^a, Luis M. Sánchez-Palestino^a, Alonzo González-González^a, Lenci K. Vázquez-Jiménez^a, Diana V. Navarrete-Carriola^a, Gildardo Rivera^{a*}

^aLaboratorio de Biotecnología Farmacéutica, Centro de Biotecnología Genómica del Instituto Politécnico Nacional, Blvd del Maestro SN, Narciso Mendoza, C.P. 88710. Reynosa, Tamps., México.

* gildardors@hotmail.com

Palabras clave: COVID-19, modelado de farmacóforo, cribado virtual, inhibidores.

Introducción

La pandemia COVID-19 es causada por el SARS-CoV-2. A nivel mundial, el número de casos está aumentando de forma alarmante y representa una preocupación continua en salud pública. Los tratamientos farmacológicos son limitados, por lo que la búsqueda de nuevas opciones terapéuticas es imperativa¹. La proteasa principal (Mpro) es una cisteín-proteasa que representa una atractiva diana farmacológica para evitar la replicación del virus². En este sentido, el diseño de fármacos asistido por ordenador (CADD por sus siglas en inglés), como el modelado de farmacóforos, el cribado virtual, el acoplamiento molecular y la dinámica molecular son los más empleados para la búsqueda, diseño y desarrollo de moléculas con actividad biológica³. El objetivo de este estudio fue evaluar *in silico* nuevos compuestos como potenciales inhibidores de la Mpro del SARS-CoV-2.

Metodología

La estructura cristalina de la Mpro del SARS-CoV-2 se obtuvo del Protein Data Bank (PDB) con código de acceso 7JKV. El modelado de farmacóforo se realizó en el servidor Pharmit (<https://pharmit.csb.pitt.edu>) donde se identificaron las características farmacofóricas del complejo proteína-ligando (Mpro-V7G). Enseguida se realizó el cribado virtual de las bases de datos MolPort, Zinc15 y National Cancer Institute (NCI). Todos los compuestos recolectados se prepararon con la herramienta OpenBabel y la proteína Mpro se preparó con USFC Chimera. El acoplamiento molecular se realizó con AutoDock Vina 1.1.2 para ello se diseñó una caja de 19.5 Å x 19.5 Å x 19.5 Å y se centró en los residuos de interés Cys145, His41 (X= -19.214, Y= 60.09, Z= 0.494). Finalmente, se analizaron las interacciones de cada complejo formado con el programa en línea Protein-Ligand Interaction Profiler (PLIP).

Resultados y discusión

Cuarenta compuestos fueron evaluados *in silico* como posibles inhibidores de la Mpro del SARS-CoV-2. Se eligieron los mejores con el mayor número de interacciones con los residuos de interés y la mejor energía libre de unión (FEB). Los compuestos C-1, C-2, C-3, C-4 y C-5 (Fig. 1) evidenciaron un valor de FEB de -8.1, -7.9, -7.7, -7.6 y -7.4 kcal/mol, respectivamente; mientras que el ligando control V7G (Fig. 1) mostró -8.2 kcal/mol.

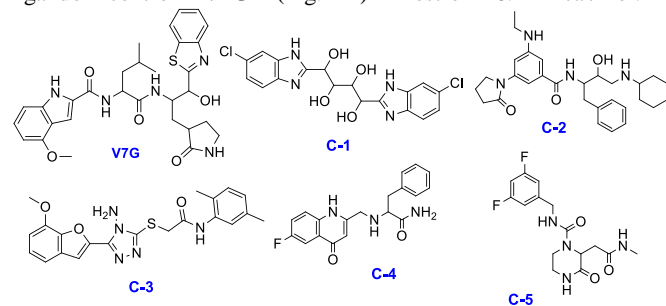


Fig. 1. Estructuras químicas de los compuestos V7G, y C-1, C-2, C-3, C-4 y C-5.

Los puentes de hidrógeno y las interacciones hidrofóbicas estabilizaron el complejo formado entre Mpro y cada ligando al interactuar con Lys27, His41, Gly143, His163 y el catalítico Cys145 (Fig. 2). Interacciones con Cys145 sugieren que los compuestos podrían inhibir irreversiblemente la Mpro, ya que están disponibles a formar interacciones covalentes con el -SH de Cys145. Sin embargo, estudios *in vitro* son requeridos para validarlo.

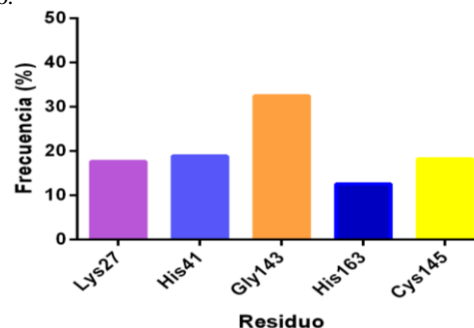


Fig. 2. Frecuencia de residuos presentes en las interacciones proteína Mpro-Ligandos.

Conclusiones

A través de un modelado de farmacóforo basado en estructura y cribado virtual se identificaron cinco compuestos (C-1, C-2, C-3, C-4 y C-5) como potenciales inhibidores de la Mpro del SARS-CoV-2, los cuales interactúan fuertemente con residuos clave (Cys145, His41). Estudios *in vitro* son requeridos para demostrar su efecto biológico.

Agradecimientos

Al Consejo Nacional de Ciencia y Tecnología-CONACyT por los estímulos económicos otorgados.

Participación de los autores

Timoteo Delgado-Maldonado: modelado de farmacóforo y cribado virtual; Luis M. Sánchez-Palestino: instalación de programa y acoplamiento molecular; Alonzo González-González: análisis de interacciones mediante scripts; Lenci K. Vázquez-Jiménez: análisis de información y redacción; Diana V. Navarrete-Carriola: diseño y construcción de gráficas; Gildardo Rivera: diseño del estudio y revisión de manuscrito.

Referencias

- Shamsi, A.; Mohammad, T.; Anwar, S.; Amani, S.; Khan, M.S.; Husain, F.M.; Rehman, M.T.; Islam, A.; Hassan, M.I. *Int J Biol Macromol.* 2021, 177, 1-9.
- Ullrich, S.; Nitsche, C. *Bioorg Med Chem Lett.* 2020, 30, 1-8.
- Opo, F.A.D.M.; Rahman, M.M.; Ahammad, F.; Ahmed, I.; Bhuiyan, M.A.; Asiri, A.M. *Sci Rep.* 2021, 11, 1-18.

Diseño *in silico* de un fármaco inhibidor de la DNA polimerasa del virus causante de la peste porcina africana

Antonio Arias-González^a, Martha Guerrero-Olazarán^a, José María Viader-Salvadó^a, Lucila Adriana Galán-Franco^a, Juan Antonio Gallegos-López^{a*}

^aUniversidad Autónoma de Nuevo León, Facultad de Ciencias Biológicas, Pedro de Alba, Ciudad Universitaria, San Nicolás de los Garza, Nuevo León.

*e-mail de autor responsable: juangallegos.lp@uanl.edu.mx

Palabras clave: VPPA predicción, docking, ligando, *in silico*,

Introducción

El virus de la peste porcina africana (VPPA) es un virus de doble cadena de la familia *Asfarviridae* perteneciente al grupo I de la clasificación de Baltimore, consta de una envoltura pleomórfica con un diámetro de entre 175 y 215 nm. Causante de una fiebre hemorrágica muy infecciosa, es capaz de producir el deceso de los cerdos tras una semana de ser infectados¹. En la actualidad, no es efectivo el uso de vacunas o la inmunización por anticuerpos, por lo que este estudio se centra en la síntesis *in silico* de un fármaco capaz de evitar la replicación del virus.

Metodología

Se obtuvieron secuencias de la DNA polimerasa del VPPA de la base de datos de NCBI a partir de cepas predominantes en regiones afectadas. Las secuencias se alinearon y se calculó una secuencia consenso que se usó para generar un modelo teórico de la DNA polimerasa empleando el programa Swiss Model. Adicionalmente, se realizó la predicción de moléculas en el programa LEA3D, utilizando como sitio de unión la zona donde se lleva a cabo la polimerización de la molécula de DNA². Además, las moléculas diseñadas se filtraron con el servidor USR-VS para seleccionar las moléculas comercialmente disponibles. Estas moléculas a su vez se filtraron con el programa Swiss ADME para seleccionar las moléculas con actividad de fármaco. El análisis de acoplamiento molecular entre la DNA polimerasa y las moléculas diseñadas se realizó con la herramienta dockthor.

Resultados y discusión

Las cepas empleadas para este estudio fueron elegidas de acuerdo con las regiones donde se han reportado casos en los últimos años³.

El acoplamiento molecular, mostró que el ligando seleccionado se une fuertemente al sitio catalítico de la DNA polimerasa con un valor de afinidad de -7.800 (Fig. 1). Este resultado sugiere que el ligando seleccionado podría inhibir la replicación del virus al interactuar con el sitio catalítico, donde se ubica la lisina 332, como ha sido reportado en la literatura⁴. La molécula comparó en la base de datos USR-VS donde se usan moléculas existentes y tenerlas como base para una futura síntesis física⁴. Peso molecular de 552.59

g/mol, soluble en agua con una lipofilicidad consenso de 2.35 Log $P_{o/w}$. Adicionalmente, el ligando seleccionado no inhibe citocromos, y es permeable a las P-glicoproteínas. Además, posee una alta absorción gastrointestinal en comparación con las otras moléculas arrojadas por Swiss ADME. La molécula pasa los filtros de Lipinski y Muegge, no presenta alertas PANS ni Brenk.

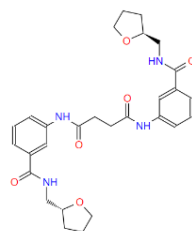
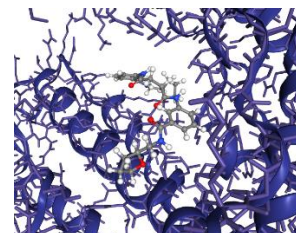


Figura 1. Estructura molecular del ligando diseñado, C₂₈H₃₄N₄O₆.

Figura 2. Molécula predicha anclada al sitio activo de la DNA polimerasa del VPPA en el programa dockThor (interacción en lisina 332).



Conclusiones

En este estudio se predijo *in silico* un ligando con potencial para interferir con la síntesis de DNA de la DNA polimerasa del VPPA.

A pesar de los resultados obtenidos mediante los programas bioinformáticos, se requerirá de más estudios *in vitro* e *in vivo* para conocer la efectividad del fármaco ante la infección del virus

Referencias

1. Njau, E. P.; Machuka, E. M.; Cleaveland, S.; Shirima, G. M.; Kusiluka, L. J.; Okoth, E. A.; Pelle, R. **2021**, 13 (11), 2285.
2. Beard, William A.; Wilson, S. H. *Biochemistry* **2014**, 53 (17), 2768–2780.
3. Portugal, R.; Coelho, J.; Höper, D.; Little, N. S.; Smithson, C.; Upton, C.; Martins, C.; Leitão, A.; Keil, G. M *Journal of General Virology* **2015**, 96 (2), 408–419. <https://doi.org/10.3390/v13112285>
4. Reyes, K.; Roxas, T.; Gomez, M.; Tayo, L. *Proceedings of the 15th International Joint Conference on Biomedical Engineering Systems and Technologies* **2022**.