



Proyecto n° PI-03-00-5734-2004

Estructura-actividad de 3-carbetoxi-4-aminoquinolinas sustituidas en C6 y C8

Responsable: Córdova de S., Tania

Etapas cumplidas / Etapas totales 1/1

Especialidad: Química computacional

Resumen: El objetivo de la investigación es la determinación de parámetros estructurales moleculares mediante métodos semiempíricos, y el patrón farmacoforo de un grupo de moléculas con la estructura común de 3-carbetoxi- 4-aminoquinolinas sustituidas en C6 y C8., para establecer factores que pudieran estar relacionados con la actividad biológica hacia *Tripanosoma cruzi*., Determina las diferencias en los mapas de potencial electrostático y cargas de algunos centros específicos como el nitrógeno del sistema quinolínico, el nitrógeno del sustituyente 4-amino y el carbonilo del grupo 3-carbetoxi, variando los sustituyentes en C6 y C8, que sugieren la importancia de factores estereoelectrónicos en la actividad biológica.

Productos

Publicaciones

Artículos

G. Cabrera, A. Yanes, M. Rodríguez, L. Escalante y T. Córdova, "Parámetros moleculares y actividad hacia *Tripanosoma cruzi* de 4-amino-3-carbetoxi quinolinas sustituidas", *Ciencia (en prensa)*.

Eventos

L. Escalante, "Síntesis de 4-amino-3-carbetoxi quinolinas sustituidas en la posición 7 y estudio de sus propiedades fisicoquímicas mediante modelaje molecular", *LVI Convención Anual de Asovac*, 2006

Otros

Tesis de Pregrado

1. Luz Escalante, "Síntesis de 4-amino-3-carbetoxi quinolinas sustituidas en la posición 7 y estudio de sus propiedades fisicoquímicas mediante modelaje molecular, 2006.
2. James Posada, "Síntesis de 4-amino-quinolinas sustituidas y estudio de sus propiedades fisicoquímicas mediante modelaje molecular, 2006.