



Proyecto n° PG-09-8814-2013

Estudio de la actividad antiviral contra flavivirus de quinolinas sustituidas y su relación estructura actividad mediante modelaje molecular

Responsable: Rodríguez Ortega, Morella

Etapas cumplidas / Etapas totales 1/2

Especialidad: Farmacología

Resumen: Los virus pertenecientes al género *Flavivirus* de la familia Flaviviridae afectan a millones de personas anualmente en con manifestaciones clínicas desde encefalitis hasta fiebre hemorrágicas, por cuanto la búsqueda de nuevos fármacos y su modo de acción se hace imperativo. Se sintetizaron serie de quinolinas sustituidas. Se le determinó citotoxicidad y una serie de parámetros físico-químicos (descriptores) de las quinolinas optimizadas con Gaussian03, utilizando diferentes programas: Gabedit, Hyperchem ChemAxon, MedChemDesigner y TEST. Con estos descriptores se construyó un modelo QSAR. Se determinó que la refractividad molar y el factor de bioacumulación son los descriptores asociados con la citotoxicidad. La robustez del modelo fue comprobada por una serie de pruebas de validación. El LD50 obtenido experimentalmente vs LD50 que predice el modelo, presenta una buena correlación con un $R^2 = 0,84$.

Productos

Publicaciones

Artículos

1. Cabrera, G., Rodríguez, M. y Tesorero, Z., "Correlación estructura- LD50 de quinolinas sustituidas utilizando teoría del funcional de la densidad (DFT)", *Avances en Química*, **11**(1): 25-33, 2016.
2. Castrillo, M., Córdova, T., Cabrera, G. y Rodríguez-Ortega, M., "Effect of naringenin, hesperetin and their glycosides form on the 17D strain of yellow fever virus", *Avances en Biomedicina*, **4**(2): 69- 78, 2015.

Otros

Trabajo de Ascenso a la categoría de Titular Gustavo Cabrera, "Fitoquímica, síntesis orgánica y modelaje molecular, algunos aspectos", 2015.

"2017: Centenario de la creación de la Academia de Ciencias Físicas, Matemáticas y Naturales".