



ÁREA TEMÁTICA: 5

NO. POSTER: 133

## CRIBADO VIRTUAL INVERSO DE COMPUESTOS DE *Tecoma stans* FRENTE A DIANAS CLAVE EN LA DIABETES

Carlos Alberto Lobato-Tapia<sup>1</sup>

<sup>1</sup> Departamento de Ciencias Químico-Biológicas, Universidad de las Américas Puebla. Ex Hacienda Sta. Catarina Mártir S/N. San Andrés Cholula, Puebla. C.P. 72810. México

### 1. INTRODUCCIÓN

La Diabetes Mellitus tipo 2 (DM2) se caracteriza por una insuficiencia relativa de insulina originada por una disfunción de las células  $\beta$  pancreáticas y resistencia a la insulina por parte de órganos diana [1]. Aproximadamente, 425 millones de personas en el mundo padecen DM2, cerca del 9% de la población [2]. En México existe una gran variedad de plantas utilizadas para tratar varios padecimientos, incluyendo la DM2. De todas ellas, *Tecoma stans* (tronadora) es una de las plantas más utilizadas contra la DM2, entre otros usos. Inclusive, se ha corroborado la eficacia de algunos de sus extractos *in vitro* e *in vivo* [3]. Así, el objetivo del presente trabajo es corroborar, *in silico*, la actividad de compuestos de *T. stans* contra DM2 con apoyo de la plataforma Dia-Db.

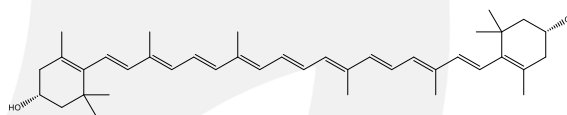
### 2. METODOLOGÍA

Se realizó la búsqueda bibliográfica de los compuestos presentes en *T. stans*, una vez obtenidos, los compuestos fueron colocados en Pubchem para encontrar sus códigos SMILES, con los cuales se realizó la búsqueda de la actividad en la plataforma web **Dia-Db** [4].



### 3. RESULTADOS

Se encontraron en total 45 compuestos provenientes de *T. stans* [5]. Con ellos, se realizó el cribado virtual inverso en la plataforma Dia-Db, la cual generó resultados sobre la probabilidad de acoplamiento entre ellos y las diferentes dianas farmacológicas con las que cuenta (todas específicas para diabetes). La mayoría de los compuestos arrojaron resultados mayores a -7.0 Kcal/mol para cada diana. Los compuestos con mejores resultados se muestran en la **Tabla 1**, junto a su diana (en código PDB) y el valor de Kcal/mol obtenido.



**Tabla 1. Compuestos con mejores resultados de acoplamiento molecular y la diana.**

Compuesto	Diana	Kcal/mol
Verbascósido	2FVJ	-10.2
Verbascósido	4K1L	-10.4
Naringina	2FVJ	-10.2
Naringina	3PEQ	-9.9
7-hidroxi flavona	4PHU	-10.7
7-hidroxi flavona	3G5E	-9.4
Zehaxantina	4PHU	-10.5
Zehaxantina	2FVJ	-10.2

### 4. CONCLUSIONES

De acuerdo con los resultados obtenidos, la gran mayoría de compuestos de *T. stans* tienen la capacidad de ser activos en el control de la diabetes, lo que corrobora el motivo de su uso en la medicina tradicional.

### 5. BIBLIOGRAFÍA

- [1]. Chaterjee, S; Khunti, K.; Davis, M. (2017). Seminar. 389(10084): 2239-2251.
- [2]. Forouhi, N.G.; Wareham, N.J. (2019). 47: 22-27
- [3]. Anand, M.; Basavaruj, R. (2021). Ethnopharmacol. 265: 1-18.
- [4]. Pérez-Sánchez H, et al. (2020). J Chem Inf Model. 60(9): 4124-4130.
- [5]. Dash, S.; Das, C.; Sahoo, D.C.; Sahoo, A.C. (2011). Nat Pharm Tech. 1(2): 5-8.