



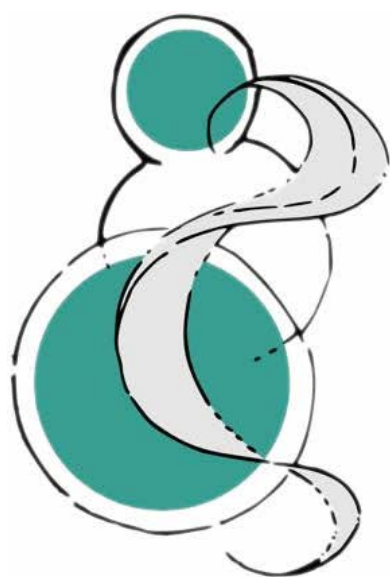
Asociación
Parasitológica
Argentina

Número especial

VIII CONGRESO ARGENTINO DE PARASITOLOGÍA

Órgano oficial de difusión científica de la Asociación Parasitológica Argentina

(Rev Arg Parasitol)



VIII CONGRESO
ARGENTINO DE
PARASITOLOGÍA

CORRIENTES 2019

**Libro de resúmenes:
VIII CONGRESO ARGENTINO DE PARASITOLOGÍA**

ASOCIACIÓN ARGENTINA DE PARASITOLOGÍA

Presidente: *Graciela T. Navone*

Vicepresidente: *Leonora E. Kosubsky*

Secretaria: *María del Rosario Robles*

Tesorera: *María Inés Gamboa*

Vocales: *María Celina Digiani,
Julia Inés Díaz, María Fernanda Achinelly*

Vocales Suplentes: *María Cecilia Ezquiaga
Marcos Butti, Paola Cociancic*

Revisor de cuentas: *Fabiana Drago*

Revisor de Cuentas suplente: *Regina Draghi*

COMITÉ ORGANIZADOR

Presidente: *Elena Beatriz Oscherov*

Vicepresidente: *Monika Hamann*

Gestión Académica: *Cynthya González*

Gestión Económico Financiera: *Francisca
Milano*

Gestión Social, Logística y Comunicación:
Ángeles Gómez Muñoz

Gestión Protocolar, Infraestructura y

Equipamiento: *Desireé Di Benedetto*

Gestión Editorial y Exposiciones: *Analía Araujo*

Gestión WEB: *Oswaldo Arbino*

Gestión Inscripción y Acreditación: *Paola
Benitez Ibaló*

Coordinación General: *Francisca Milano*

SEDE

Facultad de Ciencias Exactas y Naturales y
Agrimensura. Universidad Nacional del Nordeste.
"Campus Deodoro Roca".
Av. Libertad 5470. Corrientes. Argentina

INVITADOS ESPECIALES

Dra. Margarita Ostrowski

Dr. Jorge E. Led

COMITÉ CIENTÍFICO

Lic. Analía Araujo

Dr. Atilio Mangold

Dr. Carlos Alejandro Rauque Pérez

Médica Veterinaria Cynthia J. González Rivas,

Dr. Daniel Tanzola

Dra. Dora A. Davies

Dra. Elena Beatriz Oscherov

Dra. Fabiana B. Drago

Dr. Fabricio H. Oda

Dra. Florencia Cremonte

Dra. Francisca Milano

Lic. Gabriel Castillo

Dra. Gabriela García

Dra. Graciela T. Navone

Dra. Geraldine Ramallo

Dr. Guillermo Denegri

Dr. Gustavo Viozzi

Dra. Irina Martínez

Dr. José M. Venzal

Mgter. Juan Ramón Rosa

Dr. Juan Timi

Dra. Julia I. Díaz

Mgr. Bioq. Katherina A. Vizcaychipi

Dra. Liliana Crocco

Dra. Liliana Semenas

Dr. Luciano Alves dos Anjos

Lic. Manuel Oswaldo Arbino

Dra. Marcela Lareschi

Dra. María Cecilia Ezquiaga

Dra. María de los Ángeles Gómez Muñoz

Dra. María del Rosario Robles

Dra. María Eugenia Utgés

Dra. María Fernanda Achinelly

Dra. María Inés Gamboa

Dra. María Soledad Santini
Dra. Mariana Manteca Acosta
Dra. Marina Stein
Dr. Martín H. Fugassa
Dra. Monika I. Hamann
Dra. Nathalia J. Arredondo
Dra. Nora B. Camino
Dra. Nuria N. Vázquez
Ing. Agr. Pamela Dirchwolf
Dra. Regina Draghi
Dra. Rocío Rivero
Dr. Santiago Nava
Dra. Silvia E. Guagliardo
Dra. Valeria Debarbora
Dra. Verónica R. Flores

NÚMERO ESPECIAL DE LA REVISTA ARGENTINA DE PARASITOLOGÍA

Rev. Arg. Parasitol.

Órgano oficial de difusión científica de la Asociación Parasitológica Argentina

ISSN: 2313-9862

Revista en línea y de acceso abierto:

www.revargparasitologia.com.ar

DISEÑO WEB Y DIAGRAMACIÓN

Rocío Vega (INIBIOMA-UNCo)

AVALES INSTITUCIONALES

Universidad Nacional del Nordeste (UNNE)

Facultad de Ciencias Exactas y Naturales y Agrimensura (FaCENA – UNNE)

Facultad de Odontología (FOUNNE – UNNE)

Consejo Nacional de Investigaciones Científicas y Técnicas (CONICET)

Declaración Declinatoria: Se deja constancia que la APA no se responsabiliza por el contenido de las contribuciones de los distintos autores realizadas en el número especial, en el marco del VIII CONGRESO ARGENTINO DE PARASITOLOGÍA

CONFERENCIAS

ESTUDIO COMPUTACIONAL DE NUEVOS INHIBIDORES DE LA CRUZIPAÍNA DEL *TRYPANOSOMA CRUZI***Bogado, Maria L.¹; Luchi, Adriano M.¹; Angelina, Luis E.¹; Peruchena, Nelida M.¹**¹Lab. Estructura Molecular y Propiedades, IQUIBA-NEA, Universidad Nacional del Nordeste, CONICET, FACENA, Av. Libertad 5470, Corrientes 3400, Argentina. E-mail: lucre686@hotmail.com

La enfermedad de Chagas (CD) es una tripanosomiasis causada por el *Trypanosoma cruzi*. Una de las proteínas más importantes del agente etiológico de la CD es la Cruzipaína (Cz), la cual está involucrada en el metabolismo del parásito e identificada como un candidato importante, tanto para el desarrollo de vacunas como de nuevos fármacos anti-chagásicos. Nuestros estudios se basan en el análisis de interacciones intra-intermoleculares y estudios de relación estructura-actividad para entender el mecanismo de inhibición enzimático, con el objetivo final de diseñar inhibidores más potentes mediante cálculos computacionales. En este trabajo hemos estudiado las interacciones establecidas por ligandos halogenados (LX) y sus análogos no halogenados (LH) en el bolsillo de unión de la Cz a través de simulaciones de Dinámica Molecular (DM) y el análisis topológico de la densidad electrónica. Para revelar la importancia de las interacciones en la inhibición de la Cz comparamos los resultados obtenidos in-silico con los experimentales. El punto de partida fue el conocimiento de la estructura tridimensional de la Cz unida no-covalentemente al ligando bromado B95 (N- [2- (1H-benzimidazol-2-yl) ethyl] -2- (2-bromophenoxy) acetamide) donde el bromo forma un enlace con el átomo de azufre de la metionina 68, (BrLX... SMet68). Curiosamente el correspondiente análogo LH tiene una actividad 14 veces menor que su contraparte LX. De modo similar el derivado naftoxy-B95 exhibe una actividad 15 veces mayor que su contraparte LH. El análisis estructural como el de densidad electrónica revelaron diferencias en el modo de interacción. Los resultados indicaron que mientras LX mantiene la interacción con Met68, su contraparte LH rápidamente se separa del sitio de unión de la Cz. Este trabajo permite comprender la forma en que inhibidores potencialmente activos interactúan con el sitio de unión de la Cz y las causas de la diferencia de actividad.

PALABRAS CLAVE: cruzipaína, dinámica molecular, cálculos computacionales, interacciones moleculares.