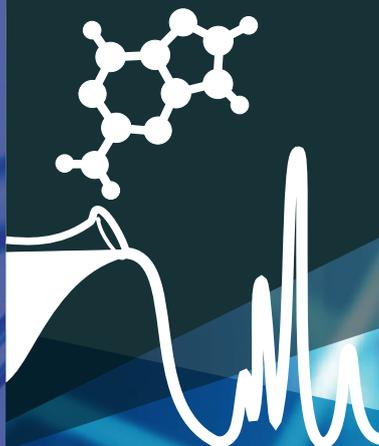


e-book ISBN 978-987-688-210-1



# XX Congreso Argentino de Físicoquímica y Química Inorgánica

*Néstor M. Correa y Luis A. Otero*

Compiladores

16 al 19 de Mayo de 2017

*Ciudad de Villa Carlos Paz, Córdoba, Argentina*

**UniRío**  
editora

## **ESTUDIO IN SILICO DE INHIBIDORES DE ACETILCOLINESTERASA PROVENIENTES DE ESPECIES DEL GÉNERO HIERONYMIELLA**

Garro Adriana, Baldoni Hector, Rodriguez Ana María, Ortiz Javier, Feresin Gabriela y Enriz Daniel  
Facultad de Química, Bioquímica y Farmacia, Universidad Nacional de San Luis.  
IMIBIO-SL (CONICET), Chacabuco 915, 5700 San Luis, Argentina.  
Instituto de Biotecnología-Instituto de Ciencias Básicas, Facultad de Ingeniería, Universidad Nacional de San Juan, Av. Libertador General San Martín 1109 (O),  
CP 5400, San Juan, Argentina  
[adrianagarros@gmail.com](mailto:adrianagarros@gmail.com)

Entre los fármacos disponibles actualmente para el tratamiento de la enfermedad de Alzheimer (EA) se encuentran los inhibidores de la enzima acetilcolinesterasa (AChE). Esta enzima es la encargada de la hidrólisis de acetilcolina la cual está involucrada en muchos aspectos de la cognición incluyendo la memoria y la atención. Si acetilcolina no es destruida puede retornar y reactivar los receptores colinérgicos retrasando la patogénesis de la enfermedad.

Con el propósito de encontrar nuevas fuentes de alcaloides anticolinérgicos se evaluaron diferentes compuestos extraídos de 5 especies del género Hieronymiella. Los resultados obtenidos experimentalmente pueden comprenderse mejor observando los sistemas a un nivel molecular, con este objetivo en mente se realizaron estudios de modelado molecular que comprenden estudios de Docking molecular, simulaciones de Dinámica Molecular (DM) seguidos de cálculos de mecánica cuántica.

Los estudios de docking predicen que todos los alcaloides analizados se unen en la misma región del sitio activo de AChE, sin embargo, las simulaciones de DM indican que estas moléculas tienen diferente disposición espacial dentro del sitio lo que permite que interactuen con diferentes aminoácidos dando lugar a interacciones de distinto tipo y fortaleza.

Los resultados obtenidos concuerdan completamente con los datos experimentales y pueden explicar la mayor actividad inhibitoria determinada para sanguinina y galantamina en relación con licorina, haemantamina y tazetina.

Los datos de energía de unión de los complejos,  $\Delta G$ , obtenidos a partir de las simulaciones de dinámica molecular permitieron diferenciar entre ligandos muy activos y ligandos inactivos.