

EVALUACIÓN *IN SILICO* DE COMPUESTOS BIOACTIVOS DE PRODUCTOS NATURALES Y SU POTENCIAL NEUROPROTECTOR

Onel Fong Lores¹, Clara A. Berenguer Rivas², Humberto J. Morris Quevedo², Marilín Calzado Ruíz¹, Yilien Fernández Urdaneta³, Sandra Hechavarría Lafargue³

¹ Centro de Toxicología y Biomedicina (TOXIMED), Universidad de Ciencias Médicas de Santiago de Cuba, Cuba

² Departamento de Farmacia, Facultad de Ciencias Naturales y Exactas, Universidad de Oriente, Cuba

³ Laboratorio Farmacéutico Oriente, Santiago de Cuba, Cuba



Email: onelfong@infomed.sld.cu; onelfong@gmail.com

INTRODUCCIÓN

Los productos naturales de Anamú, Moringa y Caña Santa comercializados por el Laboratorio Farmacéutico Oriente buscan la certificación de calidad para insertarse en el mercado internacional.

Alternativa valiosa para el tratamiento de enfermedades relacionadas con el envejecimiento.

- Estrés oxidativo
- Inflamación
- Neurodegeneración
- Neuroprotección

OBJETIVO

Evaluar el potencial neuroprotector de compuestos bioactivos de tres fitofármacos comercializados por el Laboratorio Farmacéutico Oriente.

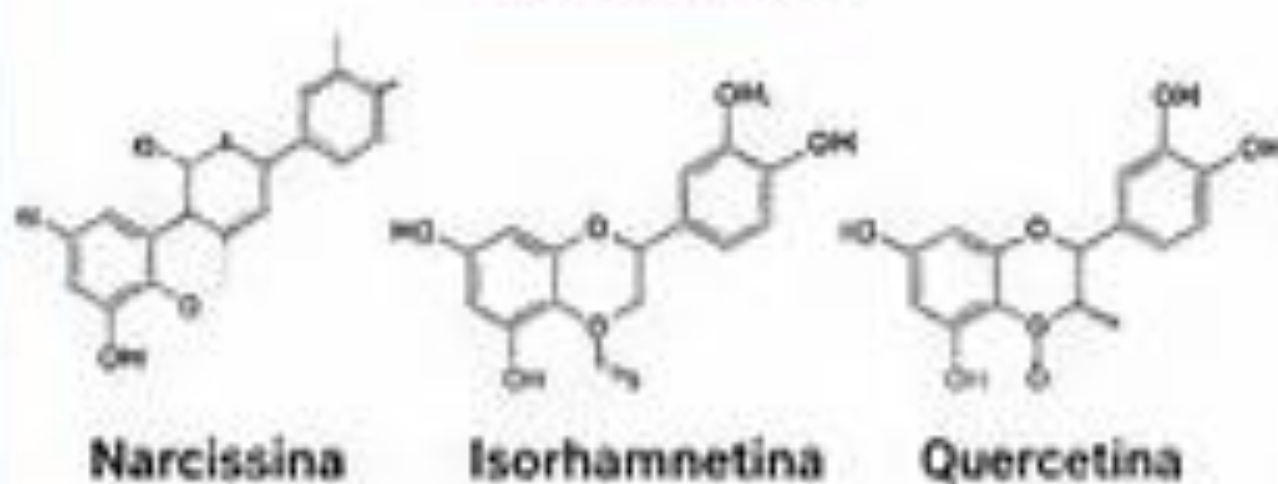
MÉTODOS



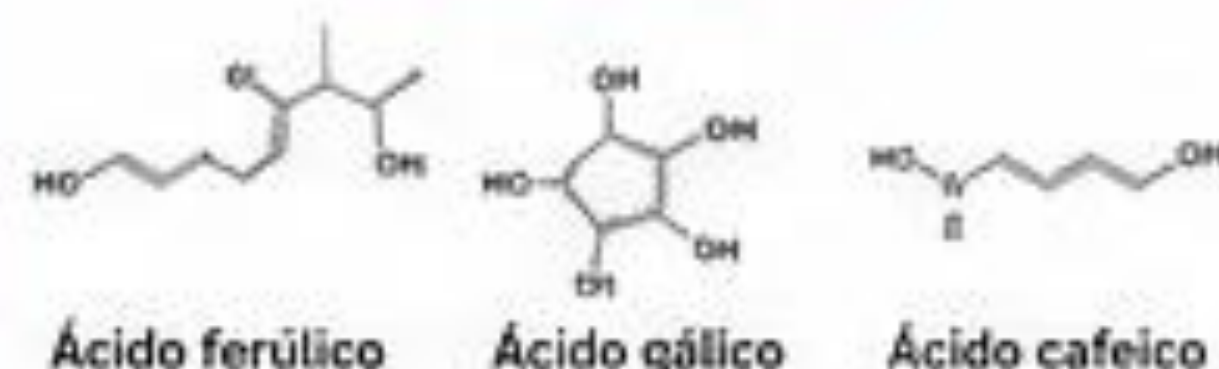
ANAMÚ
(*Petiveria alliacea*)

METABOLITOS EVALUADOS (8)

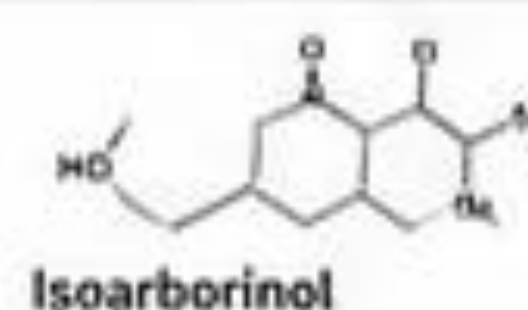
Flavonoides



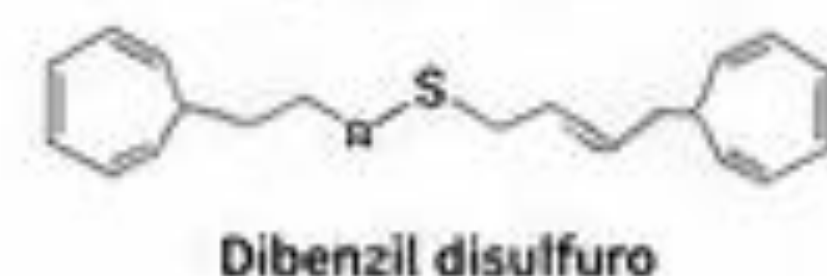
Ácidos fenólicos



Terpeno



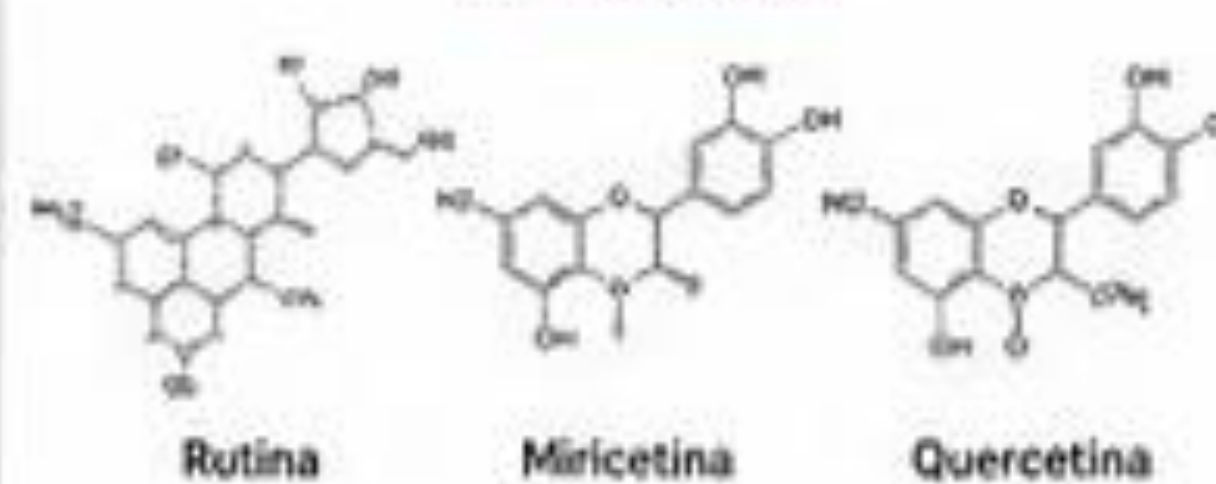
Compuesto azufrado



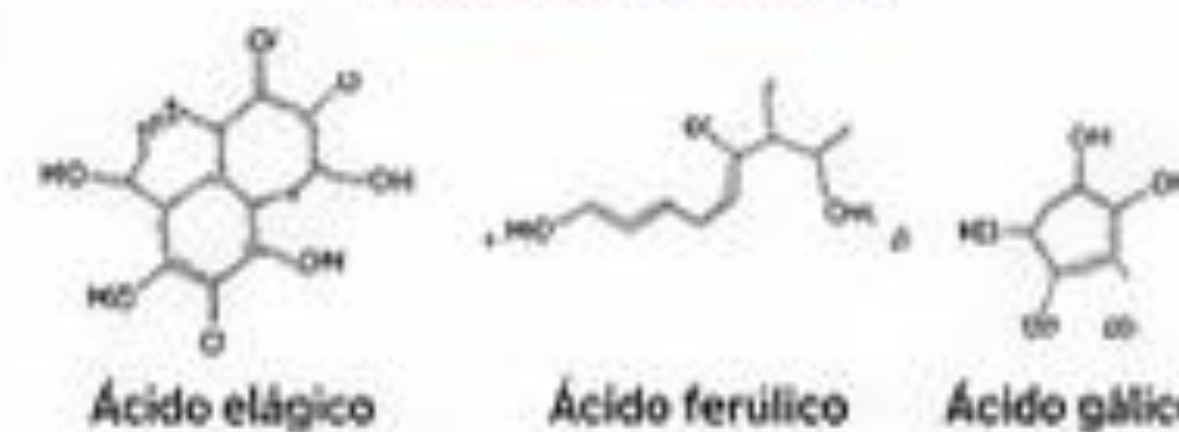
MORINGA
(*Moringa oleifera* L.)

METABOLITOS EVALUADOS (9)

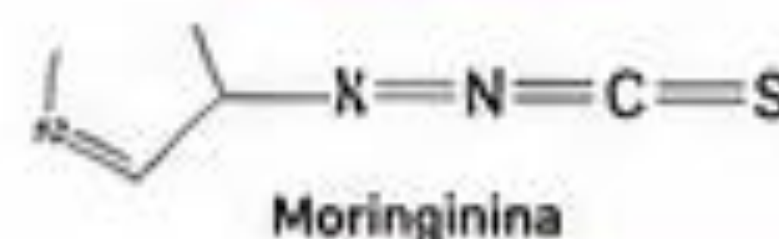
Flavonoides



Ácidos fenólicos



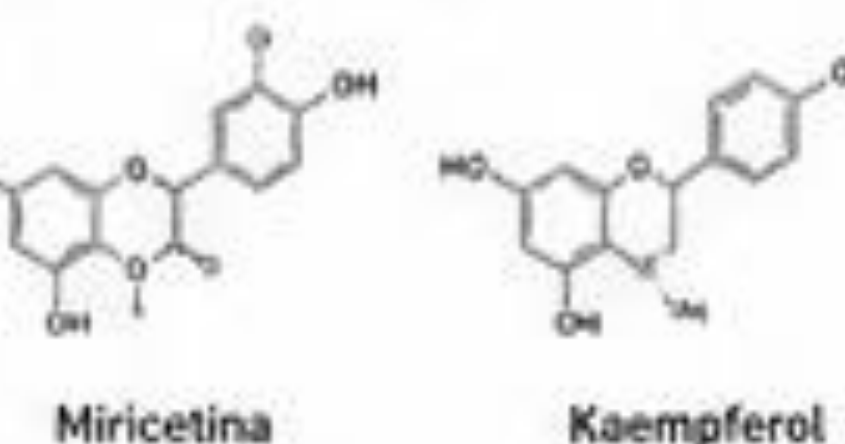
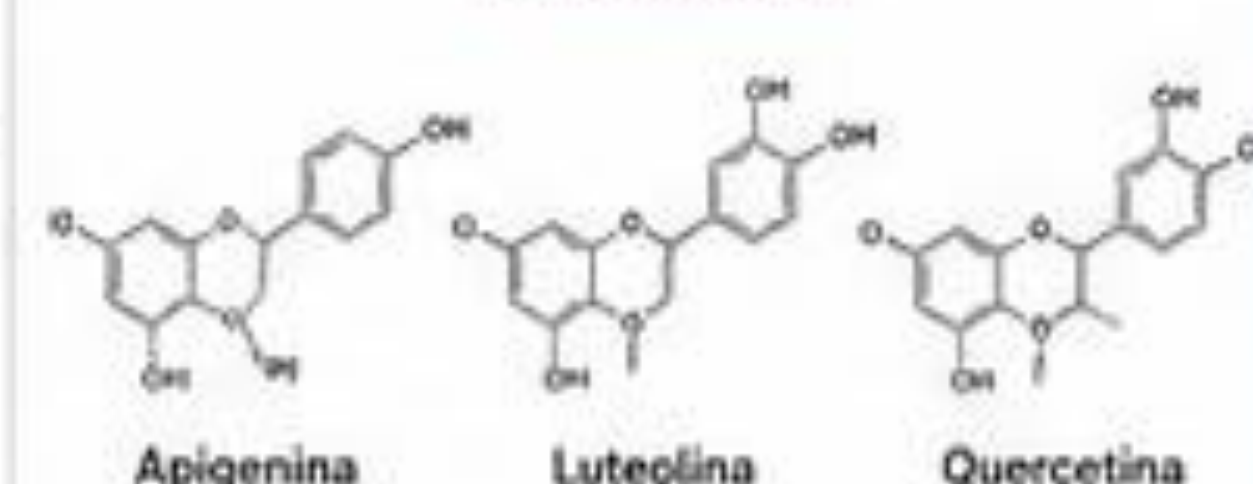
Isotiocianato



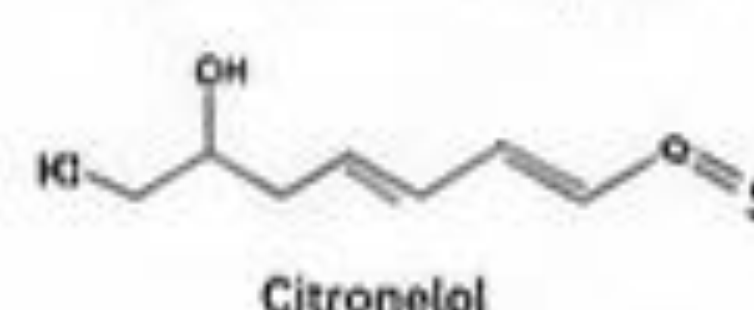
CAÑA SANTA
(*Cymbopogon citratus*)

METABOLITOS EVALUADOS (7)

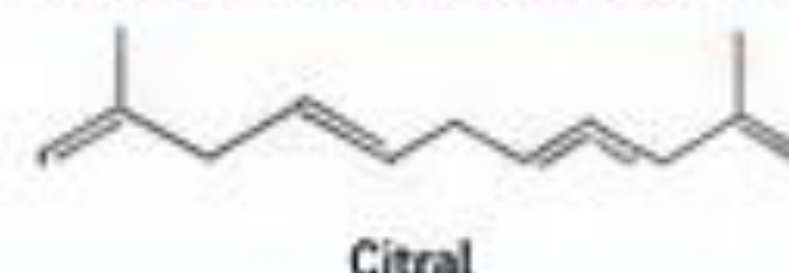
Flavonoides



Alcohol monoterpenico



Aldehído monoterpenico

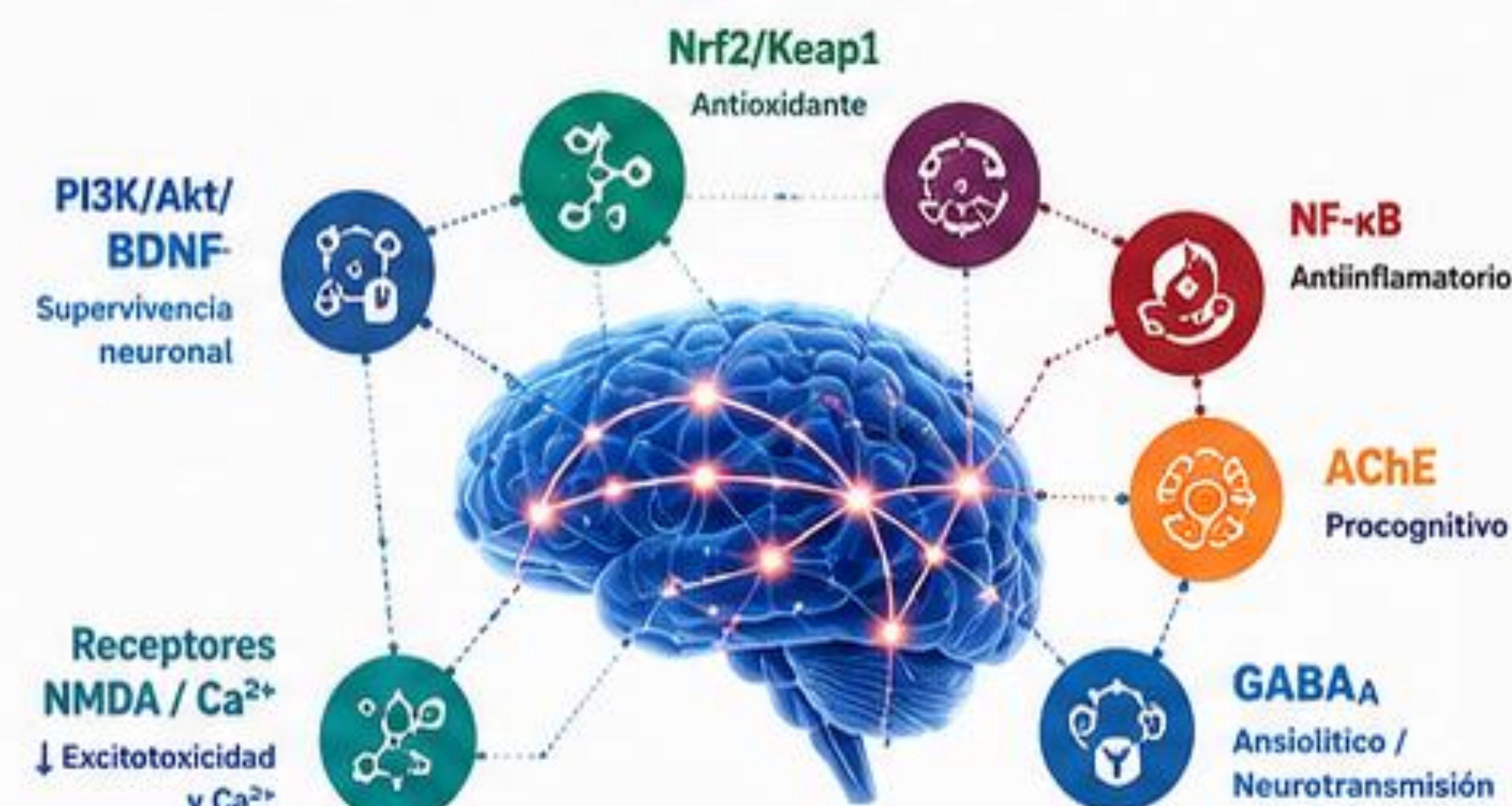


ENFOQUE *IN SILICO*



RESULTADOS

DIANAS MOLECULARES CLAVE Y MECANISMOS NEUROPROTECTORES



ACTIVIDAD PREDICHA POR GRUPOS DE COMPUESTOS

FLAVONOIDES	ÁCIDOS FENÓLICOS	TERPENOS	ISOTIOCIANATOS	COMPUESTOS AZUFRADOS
✓ Antiinflamatorio ✓ Antioxidante ✓ Neuromodulador ✓ Anti-neurodegenerativo	✓ Antiinflamatorio ✓ Antioxidante ✓ Vasoprotector ✓ Antimetastático	✓ Neuroprotección ✓ Ansiolítico ✓ Antioxidante	✓ Antioxidante ✓ Neuroprotección ✓ Supervivencia neuronal	✓ Antioxidante ✓ Antiinflamatorio ✓ Neuroprotección

RESUMEN GLOBAL DE INTERACCIONES (PREDICCIÓN *IN SILICO*)

Grupos de compuestos	Dianas moleculares clave							
	Nrf2/Keap1	NF-κB	ACHE	GABA _A	PI3K/Akt/BDNF	NMDA / Ca ²⁺	iNOS / NOX	CDKS
Flavonoides	Alta	Alta	Alta	Alta	Alta	Alta	Alta	Alta
Ácidos fenólicos	Alta	Alta	Alta	Alta	Alta	Alta	Alta	Alta
Terpenos (monoterpenicos)	Alta	Alta	Alta	Alta	Alta	Alta	Alta	Alta
Isotiocianatos	Alta	Alta	Alta	Alta	Alta	Alta	Alta	Alta
Compuestos azufrados	Alta	Alta	Alta	Alta	Alta	Alta	Alta	Alta

Alta predicción Moderada Baja Sin predicción

CONCLUSIONES



Los compuestos bioactivos evaluados presentan un potencial neuroprotector prometedor mediante múltiples mecanismos de acción.



Actúan principalmente como antioxidantes, antiinflamatorios y procognitivos, modulando dianas clave relacionadas con la neuroprotección.



Los resultados *in silico* justifican la continuación con estudios experimentales para validar su eficacia y seguridad.



Se recomienda avanzar hacia estudios *in vitro* e *in vivo* para confirmar el potencial terapéutico de estos metabolitos.