

# PERFIL ANTIOXIDANTE Y DE SEGURIDAD IN SILICO DE COMPUESTOS BIOACTIVOS DE *Mimosa pudica*

Onel Fong Lores<sup>1</sup>, David Garrido Larramendi<sup>1</sup>, Clara A. Berenguer Rivas<sup>2</sup>, Humberto J. Morris Quevedo<sup>2</sup>

<sup>1</sup> Centro de Toxicología y Biomedicina (TOXIMED), Universidad de Ciencias Médicas de Santiago de Cuba, Santiago de Cuba, Cuba

<sup>2</sup> Departamento de Farmacia, Facultad de Ciencias Naturales y Exactas, Universidad de Oriente, Santiago de Cuba, Cuba

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



## 1. INTRODUCCIÓN

*Mimosa pudica* es una planta medicinal con actividad terapéutica atribuida a sus metabolitos bioactivos. La evaluación computacional permite predecir su potencial terapéutico, seguridad y mecanismos de acción.



## 2. OBJETIVO

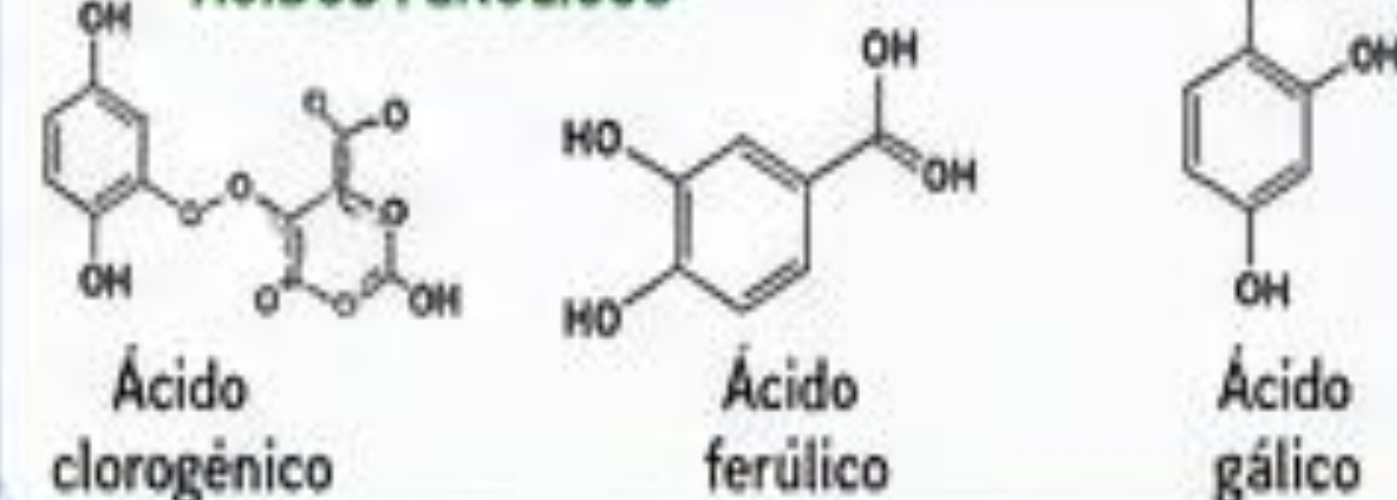
Evaluar el perfil antioxidante y de seguridad *in silico* de compuestos bioactivos de *Mimosa pudica* mediante herramientas computacionales.

## 3. METODOLOGÍA IN SILICO

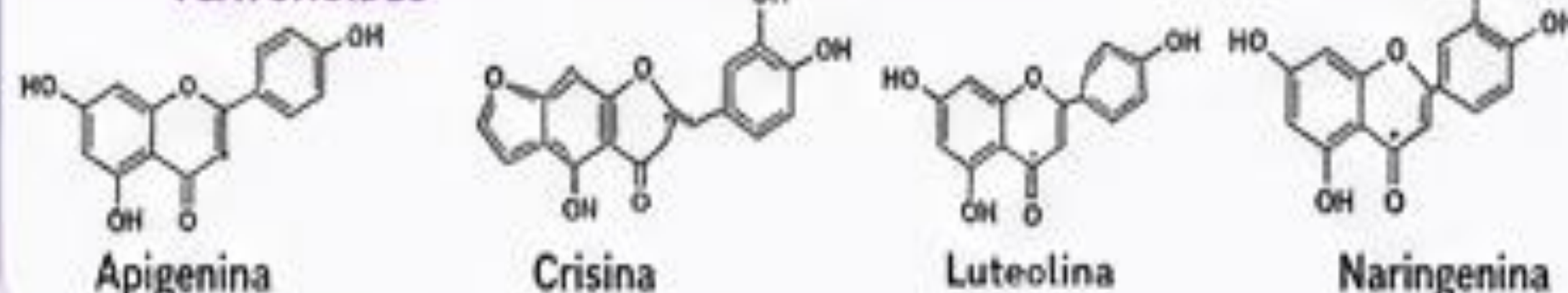


### METABOLITOS EVALUADOS

#### ÁCIDOS FENÓLICOS



#### FLAVONOIDES

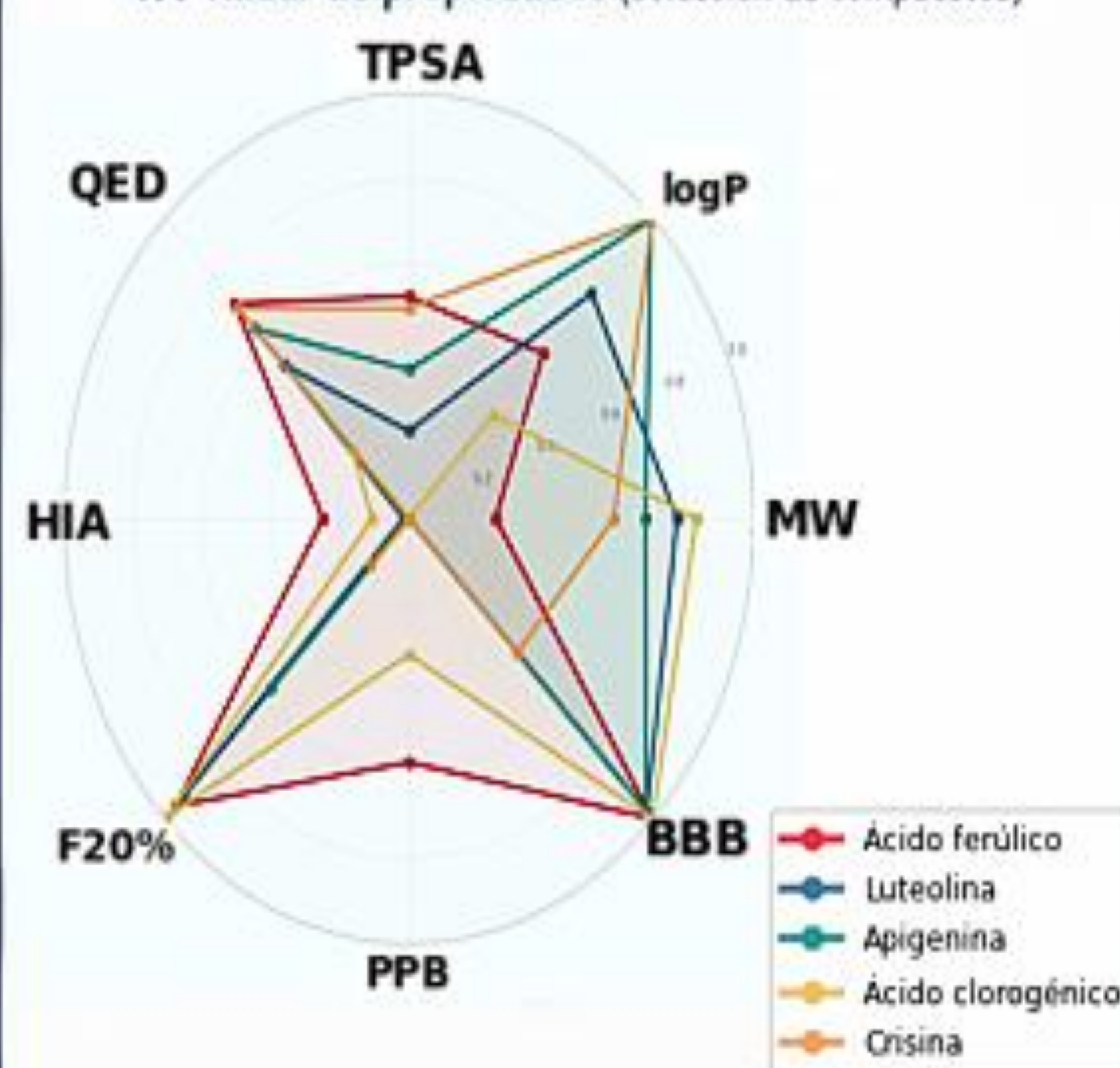


#### AMINOÁCIDO NO PROTEICO



## 4. RESULTADOS ADMET (RESUMEN VISUAL)

### 4.1 Radar de propiedades (selección de compuestos)



### 4.2 Semáforo ADMET (resumen cualitativo)

| Compuesto         | QED<br>(Drug-likeness) | HIA<br>(Absorción) | F20%<br>(<20%) | BBB<br>(Penetración) | PPB<br>(>90%) |
|-------------------|------------------------|--------------------|----------------|----------------------|---------------|
| Ácido clorogénico | ●                      | ●                  | ●              | ●                    | ●             |
| Ácido ferúlico    | ●                      | ●                  | ●              | ●                    | ●             |
| Ácido gálico      | ●                      | ●                  | ●              | ●                    | ●             |
| Apigenina         | ●                      | ●                  | ●              | ●                    | ●             |
| Crisina           | ●                      | ●                  | ●              | ●                    | ●             |
| Luteolina         | ●                      | ●                  | ●              | ●                    | ●             |
| Mimosina          | ●                      | ●                  | ●              | ●                    | ●             |
| Naringenina       | ●                      | ●                  | ●              | ●                    | ●             |
| Quercetina        | ●                      | ●                  | ●              | ●                    | ●             |

Todos los compuestos cumplen con el peso molecular óptimo (< 500 Da)

Baja absorción intestinal para la mayoría de los flavonoides

Ningún compuesto presenta capacidad significativa para cruzar la BBB

Alta unión a proteínas plasmáticas en flavonoides (>90%)

## 5. RESULTADOS DE TOXICIDAD (RESUMEN VISUAL)

### 5.1 Heatmap de toxicidad (ADMETlab)

| Compuesto         | hERG<br>(10 µM) | DILI | AMES<br>(mutagen.) | Genotoxicidad |
|-------------------|-----------------|------|--------------------|---------------|
| Ácido clorogénico | ●               | ●    | ●                  | ●             |
| Ácido ferúlico    | ●               | ●    | ●                  | ●             |
| Ácido gálico      | ●               | ●    | ●                  | ●             |
| Apigenina         | ●               | ●    | ●                  | ●             |
| Crisina           | ●               | ●    | ●                  | ●             |
| Luteolina         | ●               | ●    | ●                  | ●             |
| Mimosina          | ●               | ●    | ●                  | ●             |
| Naringenina       | ●               | ●    | ●                  | ●             |
| Quercetina        | ●               | ●    | ●                  | ●             |

● Bajo riesgo ● Moderado ● Alto riesgo

### 5.2 Toxicidad de órganos (ProTox 3.0)

|                                    | Nefrotoxicidad     | Hepatotoxicidad         |
|------------------------------------|--------------------|-------------------------|
| Activa (0,56 – 0,69)               | Activa (mayoría)   | Inactiva (mayoría)      |
| Inactiva (mayoría)                 | Inactiva (mayoría) | Activa solo en mimosina |
| Activa en la mayoría de compuestos |                    |                         |

Los flavonoides (apigenina, crisina, luteolina, naringenina y quercetina) presentaron las mayores alertas de genotoxicidad y nefrotoxicidad.

## 6. ACTIVIDAD ANTIOXIDANTE Y OBJETIVOS MOLECULARES

### 6.1 Inhibición de óxido nítrico (NO) en macrófagos (InflamNat) – Probabilidad de IC<sub>50</sub> < 50 µM

| COMPUESTO           | PROBABILIDAD |
|---------------------|--------------|
| 1 Ácido clorogénico | 0,687        |
| 2 Ácido ferúlico    | 0,662        |
| 3 Apigenina         | 0,621        |
| 4 Quercetina        | 0,611        |
| 5 Luteolina         | 0,568        |
| 6 Mimosina          | 0,535        |
| 7 Crisina           | 0,514        |
| 8 Ácido gálico      | 0,396        |
| 9 Naringenina       | 0,372        |

### 6.2 Red de objetivos moleculares principales (SwissTargetPrediction)



### 6.3 Activación de vías de señalización (Tox21)

| Receptor de estrógeno (ERα / ERβ) | Receptor de andrógeno (AR) | AhR (Receptor de hidrocarburos aromáticos) | p53 (Vía de apoptosis/daño ADN) | MMP (Potencial remodelado tisular) |
|-----------------------------------|----------------------------|--------------------------------------------|---------------------------------|------------------------------------|
| ACTIVACIÓN (Alta)                 | ACTIVACIÓN (Alta)          | ACTIVACIÓN (Moderada-Alta)                 | ACTIVACIÓN (Moderada-Alta)      | ACTIVACIÓN (Moderada)              |

Los metabolitos de *M. pudica* presentan potencial modulador de múltiples vías implicadas en estrés oxidativo, inflamación y supervivencia celular.

## 7. CONCLUSIONES



Se identificaron alertas toxicológicas importantes, especialmente en flavonoides (genotoxicidad y nefrotoxicidad predictiva).



Los resultados *in silico* sugieren que estos compuestos requieren validación experimental para confirmar su seguridad y eficacia.



La integración de herramientas computacionales constituye una estrategia útil para priorizar compuestos con mejor perfil beneficio-riesgo.



*Mimosa pudica* contiene metabolitos con potencial antioxidante y antiinflamatorio relevante.