



ANÁLISIS DE REACTIVIDAD Y BIOMODELADO DE DERIVADOS DEL BENZIMIDAZOL

César Javier Ríos Villegas¹, Ulises Guadalupe Reyes-Leaño¹, Zeferino Gómez-Sandoval¹

¹Facultad de Ciencias Químicas, Universidad de Colima, Km 9 carretera Colima-Coquimatlán,
Coquimatlán, Col., 28400, México

sbrvmc@gmail.com

Los derivados de benzimidazol han sido de gran interés, puesto que poseen diversas actividades biológicas y aplicaciones en el área clínica. Al observar la importancia del núcleo de benzimidazol, se pensó que sería conveniente diseñar o sintetizar algunos nuevos derivados, añadiendo fracciones que mejoren el potencial de su actividad biológica (Singh et al., 2012). Aunque, el mecanismo de acción de las sustancias químicas es complicado o es pobremente entendido, las metodologías de química cuántica han sido muy efectivas proveyendo información útil para entender la actividad biológica y toxicológica de muchas sustancias (Zhao et al., 2008), donde la teoría de los funcionales de la densidad se ha convertido en un caballo de batalla al momento de calcular de forma precisa descriptores de sistemas biológicos (Putz et al., 2013). Así, el análisis de descriptores como el potencial químico, dureza, suavidad e índice global de electrofilia revela parte de la naturaleza fundamental de estas moléculas (López et al., 2013).

Dentro de este ámbito, el uso de otro método computacional basado en mecánica molecular, como lo es el acoplamiento molecular, han sido de gran ayuda, permitiendo caracterizar el comportamiento de moléculas pequeñas en el sitio de unión de una proteína diana, tales como, elucidar procesos fundamentales bioquímicos (Meng et al., 2011), y particularmente para encontrar la orientación y posición de un ligando (Scior et al., 2007).

(1) Singh, N.; Pandurangan, A.; Rana, K.; Anand, P.; Ahamad, A.; Tiwari, A. K. *International current pharmaceutical journal* 2012, 1 (5), 119–127.

(2) Zhao, Y.-Y.; Tao, F.-M.; Zeng, E. Y. *Chemosphere* 2008, 73 (1), 86–91.

(3) *Applications of Density Functional Theory to Biological and Bioinorganic Chemistry*; Putz, M. V., Mingos, D. M. P., Eds.; Structure and Bonding; Springer Berlin Heidelberg: Berlin, Heidelberg, 2013; Vol. 150.

(4) López, J. M.; Ensuncho, A. E.; Robles, J. R. *Quim. Nova* 2013, 36 (9), 1308–1317.

(5) Meng, X.-Y.; Zhang, H.-X.; Mezei, M.; Cui, M. *Current computer-aided drug design* 2011, 7 (2), 146.

(6) Scior, T.; Martínez, M. E.; Salinas, S. E. *Elementos: Ciencia y Cultura* 2007, No. 68, 45–48.