



## Estudio de cribado molecular y relación cuantitativa estructura-propiedad-actividad de terpenoides con actividad larvica contra *Cx. quinquefasciatus*.

Sergio Andrade-Ochoa<sup>1</sup>, José Correa-Basurto<sup>3</sup>, Luz María Rodríguez-Valdez<sup>2</sup>, Luvia Enid Sánchez-Torres<sup>2</sup>, Guadalupe Virginia Nevárez-Moorillón<sup>2</sup>, Benjamín Noguera-Torres<sup>1</sup>.  
s\_andrade\_rat@hotmail.com; bnoguera@gmail.com

<sup>1</sup>Escuela Nacional de Ciencias Biológicas, Instituto Politécnico Nacional. CDMX, Méx.

<sup>2</sup>Facultad de Ciencias Químicas, Universidad Autónoma de Chihuahua. Chihuahua, Méx.

<sup>3</sup>Escuela Superior de Medicina, Instituto Politécnico Nacional. CDMX. Méx.

Diversos productos naturales han mostrado tener actividad repelente y larvica relevante (1), por lo que en la actualidad la búsqueda y desarrollo de nuevos agentes a partir de derivados de fitoquímicos es un área de oportunidad. En este trabajo se evalúa la actividad larvica de 25 terpenoides contra larvas y pupas de *Cx. quinquefasciatus*. Así mismo estudios de la relación estructura-actividad y propiedad-actividad se llevaron a cabo con el objetivo de identificar las propiedades estructurales y moleculares de interés biológico. Para tal efecto los sistemas moleculares fueron optimizados a nivel Ab Initio (HF) utilizando un conjunto de base 6-311G (d,p); descriptores estructurales y moleculares se obtuvieron mediante el programa Dragon. Mediante un cálculo de energía y la obtención de la energía de los orbitales frontera se calcularon descriptores mecano-cuánticos. Adicionalmente, estudios de cribado molecular se llevaron a cabo sobre la proteína acarreadora de esteroides (SCP-2), una proteína de reciente interés en la búsqueda de nuevos agentes larvicidas (2). Los resultados muestran modelos QSAR en donde el número de enlaces  $\pi$  conjugados es un descriptor estructural que contribuye en la actividad larvica, mientras que los grupos cetónicos se relacionan indirectamente. El coeficiente de partición octanol-agua, la carga total absoluta y la refractividad molar se encuentran como los descriptores que más contribuyen en la actividad. Los estudios de cribado molecular muestran que los monoterpenoides y sesquiterpenos son capaces de interactuar en el sitio activo de la SCP-2 con energías de enlace favorables, por lo que esta proteína puede ser un blanco terapéutico de estos compuestos.

1. Rahuman, A. A., Bagavan, A., Kamaraj, C., Saravanan, E., Zahir, A. A., Elango, G. Efficacy of larvicidal botanical extracts against *Culex quinquefasciatus* Say (Diptera: Culicidae). *Parasitol Res* 2009, 104, 1365–13.

2. Dyer, D. H., Lovell, S., Thoden, J. B., Holden, H. M., Rayment, I., & Lan, Q. The structural determination of an insect sterol carrier protein-2 with a ligand-bound C16 fatty acid at 1.35-Å resolution. *J Biol Chem* 2003, 278(40), 39085-39091.