



IDENTIFICACIÓN DE BLANCOS MOLECULARES PARA HIDROXANTONAS EN CÉLULAS DE CÁNCER MAMARIO

Norma Caballero¹, Tom Scior², Francisco Meléndez¹, Ramsés Ramírez, Aarón Pérez.¹

¹ Carrera de Biotecnología, Escuela de Biología, Universidad Autónoma de Puebla, Ciudad Universitaria, Puebla, Puebla, México. norma.caballero@correo.buap.mx

Departamento de Fisicomatemáticas, Facultad de Ciencias Químicas, Universidad Autónoma de Puebla, Ciudad Universitaria, Puebla, Puebla, México.

Laboratorio de Química Teórica, Centro de Investigación, Dpto. de Físicoquímica, Facultad de Ciencias Químicas, Universidad Autónoma de Puebla, Ciudad Universitaria, Puebla, Puebla, México.

e-mail: norma.caballero@correo.buap.mx

El cáncer de mama representa problema muy grande a nivel mundial desviando la atención de muchos investigadores hacia el desarrollo de nuevos fármacos de origen sintético o bien derivados de alguna fuente natural. Tal es el caso de algunos derivados de xantonas que son extraídos de *Garcinia mangostana*, *Clusiaceae* [1]. De manera especial, a las hidroxantonas se les han atribuido actividades antitumorales, pero el mecanismo de acción permanece aún desconocido. En este trabajo se presenta un estudio estructural y de acoplamiento molecular (docking) con el objetivo de simular la interacción de 12 hidroxantonas (ligandos) con dos proteínas (receptores) consideradas potencialmente blancos terapéuticos, AKT2 y Aromatasa [2]. Con lo anterior se pretende determinar si existe una interacción aceptable ligando-receptor mediante el cálculo de la energía de afinidad entre éstos. Los resultados de nuestros estudios de docking señalan que los compuestos etiquetados como 1, 3, 8, 7 y 9 presentaron mayores energías de afinidad por la AKT2, sin llegar a ser mayores que los obtenidos por los ligandos de referencia utilizados. En el caso de la Aromatasa se encontró que todos los compuestos estudiados presentaron valores de energía de afinidad muy bajos, indicando que es muy débil o nula su interacción con el receptor. Hasta el momento se establece como conclusión que la proteína AKT2 es un posible receptor en el mecanismo de acción de las hidroxantonas, no así en el caso de la Aromatasa la cual se descarta su posible participación como receptor de estos mismos compuestos y desencadenar su acción como agentes antitumorales.

1. Akao Y, Nakagawa Y, Iinuma M, Nozawa Y (2008) *Int J Mol Sci* 9:355-370
2. Shibata M, Iinuma M, Morimoto J, Kurose H, Akamatsu K, Okuno Y, Akao Y, Otsuki Y (2011) *BMC Med* 9: 69