

Herramientas Computacionales para la Identificación de Inhibidores del Metabolismo

Redox en Tripanosomátidos

Ginger.....1

Cristina Alexandra Quiroga Lozano 1

Facultad de Ciencias de la Vida, Universidad Regional Amazónica Ikiam. Vía Muyuna-Alto Tena Km 7, Tena, Napo, Ecuador

Las enfermedades tropicales desatendidas (ETD), como la enfermedad de Chagas, la leishmaniasis y la tripanosomiasis africana, afectan a millones de personas en vías de desarrollo y zonas tropicales, con altas tasas de mortalidad y morbilidad. Estas enfermedades son provocadas por tripanosomátidos, parásitos que dependen de un sistema único de metabolismo redox para su supervivencia. Sin embargo, los tratamientos actuales presentan problemas críticos: toxicidad, efectos secundarios y resistencia. Además, la baja incidencia de las ETD en países desarrollados genera falta de inversión en la investigación y el desarrollo de tratamientos innovadores para estas enfermedades.

Investigaciones previas han identificado enzimas clave en el metabolismo redox, como la tripanotona reductasa, como dianas terapéuticas prometedoras debido a su ausencia en humanos y su papel esencial en los parásitos. Adicionalmente, el uso de herramientas computacionales *in silico* ha permitido avances significativos en la identificación y optimización de compuestos con potencial terapéutico, reduciendo costos y tiempos asociados al desarrollo de medicamentos. Finalmente, el reposicionamiento de fármacos, mediante estas herramientas, facilita encontrar nuevas aplicaciones terapéuticas para medicamentos ya existentes, inicialmente desarrolladas para tratar una enfermedad, pero con potencial para abordar otras patologías, aprovechando su optimización clínica previa y disminuyendo aún más el tiempo y costo. Por lo tanto, el objetivo de la investigación es identificar inhibidores de enzimas clave del metabolismo redox en tripanosomátidos, utilizando herramientas computacionales y reposicionamiento de fármacos, con el fin de contribuir al desarrollo de tratamientos más efectivos para enfermedades tropicales desatendidas.

Palabras clave: enzimas, fármacos, *in silico*, resistencia, reposicionamiento de fármacos, tripanotona reductasa, tripanosomátidos, enfermedades tropicales.