

Evaluación *in silico* del potencial biológico de metabolitos de *Pouteria caimito* mediante estudios de ADMET, acoplamiento y dinámica molecular

Franklin Rolando Conde Velasco¹ & Karel Diéguez Santana²

¹ Facultad Ciencias de la Vida, Universidad Regional Amazónica Ikiam, Tena 150102, Ecuador.

² Universidad Regional Amazónica Ikiam, Grupo de Investigación Ecosistemas Tropicales y Cambio, Tena 150102, Ecuador.

Resumen

El abiu (*Pouteria caimito*), fruta endémica de la Amazonía, es reconocida por sus propiedades antioxidantes, antiinflamatorias, antidiabéticas y antibacterianas, atribuidas a sus metabolitos secundarios, incluyendo compuestos fenólicos, flavonoides y triterpenoides. Sin embargo, persiste una importante laguna científica: la falta de análisis exhaustivos que vinculen estos componentes químicos con dianas terapéuticas específicas a nivel molecular, y sus propiedades farmacocinéticas aún no están completamente caracterizadas. Este estudio propone un enfoque computacional para evaluar el potencial biológico de los metabolitos identificados en el abiu. Este enfoque emplea un flujo de trabajo de simulación computacional que integra tres métodos complementarios: análisis de propiedades ADMET mediante las plataformas SwissADME, Deep-PK y ProTox-III; acoplamiento molecular mediante AutoDock Vina para identificar proteínas asociadas con el estrés oxidativo, la inflamación, el metabolismo de la glucosa y la actividad antibacteriana; y simulaciones de dinámica molecular mediante GROMACS para evaluar la estabilidad de los complejos proteína-ligando óptimos. Los compuestos candidatos finales se evaluarán según un sistema de puntuación multicriterio ponderado (40 % para acoplamiento molecular, 30 % para estabilidad de dinámica molecular y 30 % para propiedades ADMET) basado en la prioridad. El objetivo es seleccionar compuestos fenólicos y triterpenoides con alta afinidad de unión, buena estabilidad conformacional y características farmacocinéticas adecuadas para dianas terapéuticas clave, proporcionando así una base científica sólida para futuros estudios experimentales *in vitro* e *in vivo* y el desarrollo de suplementos nutricionales derivados de la biodiversidad amazónica.

Palabras clave: ADMET, acoplamiento molecular, dinámica molecular, metabolitos bioactivos, *Pouteria caimito*