

EDITORIAL

Molecular Docking: una poderosa herramienta para el diseño de fármacos

En la actualidad el método de acoplamiento molecular *-molecular docking-* es considerado una valiosa herramienta en la industria farmacéutica y biotecnológica para la identificación y desarrollo de nuevas moléculas con posible actividad terapéutica. Este interesante instrumento bioinformático cumple con los principios básicos del modelo clásico *llave-cerradura* sugerido por Fischer E. (1880) que consistía en el acoplamiento recíproco entre *ligando* y *receptor*. Así como también con la teoría propuesta por Koshland D. (1958), la cual establece un modelo de *ajuste inducido* producto del cambio espacial en los sitios activos del *receptor* cuando interactúa con el *ligando*. En años recientes, los estudios realizados por Buyong M. (2003) introducen un nuevo enfoque sobre el reconocimiento molecular que se deriva de la capacidad que tienen ciertos *receptores* para adoptar conformaciones con forma de bisagra los cuales favorecen el encaje con distintos *ligandos*. El ensayo *in silico* genera una imagen tridimensional para la simulación teórica predictiva de las mejores posturas espaciales entre pequeñas moléculas que actúan como *ligandos* y ciertas macromoléculas como: proteínas, ácido desoxirribonucleico y ácido ribonucleico, consideradas blancos terapéuticos por su acción como *receptores*, asimismo, su versatilidad y dinamismo permite determinar las posibles uniones entre proteína-proteína y ácidos nucleicos-proteínas. Desde el lanzamiento del primer software denominado DOCK (1982), se han desarrollado durante las últimas dos décadas nuevas aplicaciones con fines educativos y corporativos, las cuales se fundamentan en establecer las posibles poses y orientaciones entre *ligando* y *receptor* utilizando ciertos algoritmos de búsqueda del tipo sistemático, estocástico y simulado. Seguidamente con los mejores complejos formados determinan para cada punto activo específico su estabilidad energética calculando las variables termodinámicas constantes de inhibición enzimática (k_i) y variación de la energía libre de Gibbs (ΔG).

Dr. Alexis A. Buitrago D.
Grupo "Biomoléculas Orgánicas"
Departamento de Análisis y Control.
Facultad de Farmacia y Bioanálisis
Universidad de Los Andes

REVISTA DE LA FACULTAD DE FARMACIA

Vol. 62 (Número Especial)

enero-diciembre 2020

ISSN 0543- 517-X Depósito Legal pp 1958 02 ME 1003

ISSN 2244-8845 Electrónico Depósito Legal ppi 2012 02

ME 4102

Nota de la Editora

Actualización de la imagen de la portada de la Revista de la Facultad de Farmacia

La imagen de una revista representa su identidad y debe distinguirse del resto de las publicaciones periódicas. En ocasiones es necesario realizar cambios a dicha imagen con el objetivo de dar un aspecto más moderno. En este sentido, la portada de la Revista de la Facultad de Farmacia ha permanecido sin cambios por más de una década, razón por la cual el actual Comité Editorial tomó la iniciativa de realizar una actualización a dicha imagen atendiendo los aspectos formales establecidos por el Programa de Publicaciones del CDCHTA-ULA. En esta actualización se incluyen imágenes representativas de las áreas del conocimiento que abarca la Revista conservando el color naranja del fondo y mostrando una fotografía desde otro punto de enfoque del edificio de la Facultad, los cuales se consideran elementos protagónicos e icónicos de esta Revista.

Dra. Janne Rojas Vera, Editora

CONTENIDO

ARTÍCULOS ORIGINALES

Perfil fitoquímico, actividad biológica y fotoprotectora de las flores de *Aldama dentata* La Llave et Lex.

Phytochemical profile, biological and photoprotective activity of the flowers of *Aldama dentata* La Llave et Lex.

Autores: Isla Marylenlid, Pérez Alida, Obregon Ysbelia, Aparicio Rosa, Cordero Yndra, Díaz Clara, Isla José, Chacón Carmen, Fernández Jhender, Rojas-Fermín Luis.....4

Análisis fitoquímico preliminar y evaluación de la actividad antibacteriana de fracciones de diferentes polaridades obtenidas de *Vismia baccifera* (L.) Triana & Planch y *Vismia macrophylla* Kunth.

Preliminary phytochemical analysis and evaluation of antibacterial activity of different polarities fractions obtained from *Vismia baccifera* (L.) Triana & *Vismia macrophylla* Kunth.

Autores: Buitrago-Díaz Alexis Alberto, Rojas-Vera Janne, Velasco-Carrillo Judith. 15

Valoración de dietas a base de *Leucaena leucocephala* (Lam.), *Machaerium sp* y *Glycine max* (Soya) para la alimentación de alevines de *Colossoma macropomum* (cachama negra).

Evaluation of diets based on *Leucaena leucocephala* (Lam.), *Machaerium sp* and *Glycine max* (Soya) for the feeding of *Colossoma macropomum* (cachama negra) alevins.

Autores: Visbal Tomas, Morillo Marielba, Rial Leandra, Betancourt Carlos, Medina Ana Luisa.
.....23

Actualización de la imagen de la Revista de la Facultad de Farmacia.

Faculty of Pharmacy Journal image actualization.

Autores: Rojas-Vera Janne, Buitrago-Díaz Alexis, Meccia Gina, Rondón María Eugenia, Rojas Julio.....34
Normas editoriales.....39
Reglamento para el arbitraje.....54
Índice acumulado.....56