



<p>ESTUDIO PRELIMINAR DE LA ACTIVIDAD ANTIMICROBIANA DE EXTRACTOS PEPTÍDICOS DE SEMILLAS DE <i>Moringa oleifera</i> L. .... 236</p>	
<p>COMPARACIÓN QUÍMICA EN HOJAS Y TALLO DE <i>Cupressus sempervirens</i> ("CIPRÉS") DE ORIGEN CUBANO. .... 237</p>	
<p>COMPARACIÓN DE COMPONENTES QUÍMICOS DE SEMILLAS DE <i>Chenopodium quinoa</i> W. Y DE <i>Sesamun indicum</i> L. .... 238</p>	
<p>EVALUACIÓN FARMACOGNÓSTICA, FITOQUÍMICA Y ACTIVIDAD ANTIOXIDANTE DE <i>Guettarda calyptrata</i> A. Rich. .... 239</p>	
<p>PARÁMETROS FARMACOGNÓSTICOS DE <i>Murraya paniculata</i> L. (Jack) Y PROPUESTA DE UN GEL ANTIINFLAMATORIO. .... 240</p>	
<p>DETERMINACIÓN DEL PERFIL DE ÁCIDOS GRASOS EN EL ACEITE DE HÍGADO DE TIBURÓN. .... 241</p>	
<p>INFLUENCIA DE LAS CONDICIONES DE OPERACIÓN EN LA EXTRACCIÓN DE CAROTENOIDES. .... 242</p>	
<p>NEW PHYTOCHEMICAL PROFILE OF ETHANOLIC EXTRACT FROM <i>Talipariti elatum</i> (SW.) IN CUBA. .... 243</p>	
<p>DETERMINACIÓN DEL BALANCE HIDRÓFILO LIPÓFILO DEL ACEITE DE MORINGA. .... 244</p>	
<p>MODELACIÓN COMPUTACIONAL. .... 245</p>	
<p>PRESENTACIONES ORALES. .... 245</p>	
<p>PREDICCIÓN DE LA SOLUBILIDAD EN AGUA DE COMPUESTOS DE INTERÉS FARMACÉUTICO. .... 245</p>	
<p>CONFORMATIONAL STUDY OF THREEE NOVEL ANDROSTANE-[60]FULLERENE HYBRIDS. .... 246</p>	
<p>PRONOSTICOS DE LA MULTIRRESISTENCIA ANTIMICROBIANA DE LAS CEPAS DE <i>E. coli</i>, <i>C. freundii</i>, <i>P. agglomerans</i> EN LAS ITU. .... 247</p>	
<p>MODELACIÓN MULTIVARIADA DE LA ACTIVIDAD ANTICOAGULANTE EMPLEANDO LA METODOLOGÍA MODESLAB. .... 248</p>	
<p>THEORETICAL EVALUATION OF FAMILY 18F-N-ETHOXY-METHYL-TRIAZOLE LOSARTAN AS RADIOPHARMACEUTICAL CANDIDATES FOR CANCER DIAGNOSIS. .... 249</p>	
<p>PREDICCIÓN DE ÍNDICES/TIEMPOS DE RETENCIÓN CROMATOGRÁFICOS EMPLEANDO UNA APROXIMACIÓN MODESLAB. .... 250</p>	
<p>ANÁLISIS COMPUTACIONAL DE LAS ENERGÍAS DE INTERACCIÓN DEL HIF-2<math>\alpha</math>/ HIF-1<math>\beta</math> PARA EL DISEÑO DE NEM. .... 251</p>	
<p>OPTIMIZACIÓN DE LOS PARÁMETROS DE EXTRACCIÓN DE MANGIFERINA POR MICROONDAS A PARTIR DE HOJAS DE MANGIFERA INDICA L. .... 252</p>	





PRESENTACIONES ORALES.

**CARACTERIZACIÓN QUÍMICA DEL CARAO (*Cassia grandis* L.) CULTIVADO EN HONDURAS.**

Jhonor Abraham Marcia Fuentes<sup>1</sup>, Héctor Zumbado Fernández<sup>2</sup>, Elisa Aznar González<sup>3</sup>. <sup>1</sup> Universidad Nacional de Agricultura, Honduras; <sup>2</sup>Instituto de Farmacia y Alimentos, Universidad de La Habana, Cuba; <sup>3</sup> Centro Nacional de Biopreparados, Cuba. [juniorabrahamm@yahoo.com](mailto:juniorabrahamm@yahoo.com).

En este trabajo se presenta la caracterización química del carao (*Cassia grandis* L.) cultivado en Honduras. Se emplearon muestras de carao procedente de tres zonas de Honduras: Choluteca, Francisco Morazán y Olancho. Se realizaron análisis de humedad, materia seca, cenizas totales, grasas, proteínas y fibra cruda, así como la determinación de hierro, calcio, fósforo, magnesio, cobre y zinc por espectrometría de absorción atómica. Se determinó además la energía bruta por calorimetría. Los análisis se realizaron por triplicado a la cáscara, la pulpa y la semilla del carao de las tres zonas estudiadas. De acuerdo a los resultados obtenidos del análisis químico, se concluye que no existe diferencia significativa ( $p > 0,05$ ) en la composición química del carao entre las muestras provenientes de las tres zonas en estudio, esta simetría se debe a que presentan iguales condiciones edafoclimáticas para el cultivo. Sin embargo si existe diferencias significativas ( $p < 0,05$ ) entre la cascara, pulpa y semilla, en cuanto a su composición química. En relación a la concentración de hierro presente en la pulpa del carao y a su fácil solubilidad, se concluye la importancia de su uso como un posible anti anémico de origen natural, de bajo costo y de fácil acceso para la población hondureña.

EFECTO ANTIFÚNGICO Y ANTIBACTERIANO DEL ACEITE ESENCIAL Y DEL EXTRACTO ETANÓLICO DEL RIZOMA DE *Zingiber officinale* (JENGIBRE).

<sup>1</sup> Jean Carlo González-Guevara <sup>2</sup> German L Madrigal Redondo <sup>2</sup> Rolando Vargas Zuñiga, <sup>1</sup> Santiago Rodríguez Sibaja. <sup>1</sup> Universidad Latina de Costa Rica. San José, Costa Rica. <sup>2</sup> Facultad de Farmacia, Universidad de Costa Rica, San José, Costa Rica. [jean93g@hotmail.es](mailto:jean93g@hotmail.es).

El objetivo fue caracterizar por métodos fisicoquímicos la composición química del aceite esencial de rizomas de *Zingiber officinale* cultivado en la zona de San Carlos, Costa Rica y comparar su efecto antifúngico y antibacteriano a fin de estandarizar futuros cultivos de forma hidropónica y validar su efecto farmacológico o cosmético. Se realizó una extracción etanólica con Soxhlet y destilación por arrastre con vapor, se realizó un perfil fitoquímico cualitativo para el extracto etanólico, el aceite esencial se estudió por medio de Cromatografía de Gases acoplada a un detector Masas (GC-MS), se realizaron ensayos microbiológicos por difusión de placa para los extractos etanólicos y el aceite esencial con cepas de bacterias y hongos comunes en las patologías cutáneas, se realizaron microfotografías por medio de un microscopio de barrido electrónico. Se determinó cualitativamente la presencia de flavonoides, alcaloides, saponinas, taninos y triterpenos en el extracto etanólico. Los principales compuestos en el aceite esencial fueron geranial (27.42%), neral (20.11%), 1.8-cineol (13.35%), canfeno (4.65%) y E-geraniol (3.92%), diferente con lo reportado en otros estudios, lo que pronostica un comportamiento antimicrobiano diferente. El aceite esencial inhibía el crecimiento de *Staphylococcus aureus*, *Escherichia coli*, *Streptococcus pyogenes*, *Staphylococcus epidermidis*, *Candida albicans*, *Enterococcus faecalis*, pero no *Pseudomonas aureginosa*; el extracto etanólico no mostró actividad antifúngica ni antibacteriana, el mecanismo de acción del aceite esencial incluía la destrucción de la membrana mediante la formación de poros y un choque osmótico.

ASPECTOS DE CALIDAD DE LOS PRODUCTOS NATURALES EN ENSAYOS CLÍNICOS.

Sirley González Laime, Raquel Castanedo Valdés, Zuleika Casamayor Laime. Grupo Empresarial LABIOFAM, Cuba.

La comercialización de productos naturales, es una tendencia que ha tomado más fuerza en los últimos años en la Industria Farmacéutica mundial, Cuba no está exenta de esta realidad. Previo a esa fase se requieren evidencias científicas de la evaluación clínica de estos productos, sin embargo las regulaciones vigentes en el país para su registro sanitario definitivo no abarcan todos los aspectos que garanticen la veracidad de los resultados obtenidos. El objetivo del trabajo fue elaborar una propuesta de requisitos de calidad para la etapa de investigación y desarrollo de suplementos nutricionales derivados de productos naturales, previos a su evaluación clínica. La investigación se clasificó como aplicada. Se emplearon los métodos: revisión bibliográfica, análisis síntesis e histórico lógico para recopilar, analizar y resumir en orden cronológico la información referida, análisis documental para el diagnóstico de tecnologías y expedientes de registro, y estadísticos en el procesamiento y presentación de los resultados. Para la validación de la propuesta se empleó el Método de expertos. Se revisó el estado de la temática y su ámbito regulador tanto a nivel internacional como nacional. Además se diagnosticaron las tecnologías y expedientes de registro de los suplementos nutricionales de LABIOFAM, fueron identificados los aspectos de calidad que deben quedar definidos durante el proceso de desarrollo y se diseñó la propuesta. La propuesta elaborada constituye una herramienta para llevar a cabo con eficiencia y calidad la investigación y desarrollo de suplementos nutricionales de origen natural, previo a su evaluación clínica.

COMPOSICIÓN FENÓLICA Y ACTIVIDAD ANTIOXIDANTE DE LAS HOJAS DE *Mosiera crenulata*.

Osmary Fernández Expósito<sup>a</sup>, María Elisa Jorge Rodríguez<sup>a</sup>, Lorena González González<sup>b</sup>, Anh Nguyen Ngoc<sup>a</sup>. <sup>a</sup> Departamento de Farmacia, Facultad Química-Farmacia, Universidad Central “Marta Abreu” de Las Villas, Santa Clara, Villa Clara, Cuba. <sup>b</sup> Policlínico Manuel Piti Fajardo Rivera, MINSAP, Camajuaní, Villa Clara, Cuba. [ofernandez@uclv.cu](mailto:ofernandez@uclv.cu)

Las plantas medicinales son una fuente importante de compuestos antioxidantes que permiten retrasar, prevenir o eliminar el daño oxidativo generado por las especies reactivas de oxígeno y con ello el desarrollo de enfermedades. Se realizó un estudio experimental para evaluar desde el punto de vista farmacológico *in vitro* la actividad antioxidante del extracto metanólico obtenido de las hojas de *Mosiera crenulata*. Se analizó cualitativamente la composición química del extracto y se determinó el contenido de fenoles y flavonoides. Se evaluó *in vitro* la actividad antioxidante mediante los ensayos: secuestro del radical DPPH y actividad quelante. Alcaloides, coumarinas, fenoles y flavonoides constituyeron los principales metabolitos identificados en el extracto metanólico. El contenido fenólico y de flavonoides resultó de 658.21 mg de ácido gálico equivalente/g de extracto y 183.9 mg de rutina equivalente/g extracto seco, respectivamente. Los mejores resultados en la actividad antioxidante *in vitro*, se obtuvieron para la actividad antirradicálica a través del ensayo de DPPH ( $IC_{50}=28.8 \mu\text{g/mL}$ ) con valores similares al Eugenol ( $IC_{50}=29.0 \mu\text{g/mL}$ ), reconocido patrón antioxidante. El extracto metanólico de *Mosiera crenulata* mostró potencialidades como antioxidante, lo que puede ser atribuido, al menos en parte, a su composición fenólica.

---

**ACTIVIDAD ANTIMICROBIANA DE LAS HOJAS DE LA ESPECIE *Zanthoxylum pistacifolium* Griseb (RUTACEAE).**

Rosalía González Fernández<sup>1</sup>, Yamilé Heredia Díaz<sup>2</sup>, Julio César Escalona Arranz<sup>2</sup>, Jesús García Díaz<sup>2</sup>. 1 Centro de Toxicología y Biomedicina (TOXIMED), Universidad DE Ciencia Médicas Santiago de Cuba, Cuba; 2 Departamento de Ciencias Farmacéuticas, Facultad de Ciencias Naturales y Exactas, Universidad de Oriente, Santiago de Cuba, Cuba. [rgonzalez@toximed.scu.sld.cu](mailto:rgonzalez@toximed.scu.sld.cu)

La especie *Zanthoxylum pistacifolium* Griseb (endémica cubana) no se le han reportado antecedentes de actividad biológica, por lo que en este estudio se pretende evaluar la actividad antimicrobiana. Las hojas de la especie vegetal *Zanthoxylum pistacifolium* Griseb, se recolectaron en el poblado de Siboney, en Santiago de Cuba. Luego se realizó la identificación taxonómica por especialistas del Centro Oriental de Ecosistemas y Biodiversidad con el número de ficha 21660. A siete fracciones derivadas de un extracto etanólico total se les evaluó la actividad antimicrobiana a través del método de dilución. Las cepas empleadas fueron *Candida albicans* azol, *Candida glabrata*, *Candida kefyr*, *Candida krusei*, *Candida parapsilosis*, *Candida tropicalis* *Staphylococcus aureus*, *Escherichia coli*, *Pseudomona aeruginosa* y *Leishmania amazonensis*. Todas las fracciones evaluadas, mostraron inhibición del crecimiento microbiano superior al 50 % para al menos cuatro cepas microbianas, predominando la acción sobre levaduras. De las siete fracciones evaluadas, seis mostraron inhibición selectiva frente a *S. aureus*, aunque sólo dos de ellas (FH y FHB) clasifican como buena actividad. Las fracciones más polares (FB<sub>A</sub> y FMA<sub>A</sub>) exhibieron débil actividad para esta cepa bacteriana. Sólo la fracción de Diclorometano mostró actividad inhibitoria moderada contra *Leishmania amazonensis*. Se demostró que de las siete fracciones ensayadas, las menos polares (Fracciones Hexánica, Hexano-Butanona y Diclorometano), exhibieron potente actividad frente a las especies de *Candida* sp., siendo *C. tropicalis* la más resistente. Solamente la fracción Diclorometano mostró moderada actividad frente a *Leishmania amazonensis*, mientras que la de Hexano-Butanona resultó citotóxica.





IDENTIFICACIÓN Y EVALUACIÓN DE SAPONINAS Y OTROS METABOLITOS SECUNDARIOS  
EN SEMILLAS DE *Chenopodium quinoa* Willd.

Lidia Caridad Díaz Fernández, Beatriz Tamargo Santos, Eva Salas Olivet. Instituto de Farmacia y Alimentos, Universidad de La Habana, Cuba. [lilydf010592@gmail.com](mailto:lilydf010592@gmail.com)

*Chenopodium quinoa* Willd a pesar de ser empleada hace más de mil años, es objeto de estudio de muchas investigaciones recientes por las propiedades medicinales y nutricionales de sus extractos: la reducción del riesgo de enfermedades cardiovasculares, desórdenes neurodegenerativos y diabetes, inhibición de procesos inflamatorios y la angiogénesis del tumor, interfiriendo en la promoción y progresión del cáncer. Está caracterizada por la presencia de saponinas con varias propiedades biológicas referidas, dentro de ellas la actividad hemolítica. Para corroborar tales referencias se llevó a cabo esta investigación. Se adquirió información general de los metabolitos secundarios presentes en los extractos de semillas por un tamizaje fitoquímico. Se obtuvieron extractos acuosos de semillas utilizando la maceración asistida con agitador magnético (AM) y licuadora (L), determinando en cada extracto cualitativamente la presencia de azúcares reductores, taninos, aminoácidos libres, mucílagos, principios amargos y gran cantidad de saponinas, y cuantitativamente la presencia de carbohidratos y proteínas; en ambos casos el extracto L tuvo mayor concentración que el AM. Se identificaron por CCD las saponinas presentes en ambos extractos, empleando la actividad hemolítica media estas se cuantificaron, y se evaluó su toxicidad mediante el ensayo de hemólisis de los eritrocitos, obteniéndose mayor concentración de saponinas y, por tanto, mayor AH<sub>50%</sub> en el extracto L. CCD-Cromatografía en Capa Delgada; AH<sub>50%</sub>-Actividad Hemolítica Media.

DETERMINACIÓN DEL POSIBLE EFECTO SENSIBILIZANTE DEL EXTRACTO DE *Elaeis guinnensis* Jacq 50 %.

Idelsis Esquivel Moynelo. Hospital Dr. Luís Díaz Soto (Naval)-Departamento de Investigaciones Médico Militares (DIMM). [ocouso@infomed.sld.cu](mailto:ocouso@infomed.sld.cu).

La especie vegetal *Elaeis guineensis* Jacq, de igual nombre binomial, llamada palma africana es de: Género: *Elaeis*, Familia: *Arecacea*. Análisis fitoquímicos arrojan presencia de flavonoides, taninos, fenoles, triterpenos y esteroides; metabolitos con propiedades antiinflamatorias. El extracto acuoso de *Elaeis guinnensis* Jacq 50% se utilizará como antiinflamatorio, por lo que se realizó el presente estudio que nos garantiza dentro del margen de error que siempre tiene aparejada la extrapolación del animal al hombre, que los productos que no resulten tóxicos, no lo serán potencialmente en el hombre. Teniendo en cuenta el uso de la especie vegetal por diversas comunidades y su posible efecto sensibilizante, realizamos este ensayo de sensibilización para determinar la toxicidad o no, que pudiese ocasionar el extracto, cuando sea empleado en humanos. Determinar el posible efecto sensibilizante del extracto de *Elaeis Guinnensis* Jacq 50 %, cuando se administra reiteradamente en los animales de experimentación. Se realizó el ensayo en curieles albinos jóvenes de ambos sexos de la línea Hartley, el ensayo consta de dos fases, una inductiva y otra de desafío. Se utilizan 30 cobayos, 20 tratados (Extracto *Elaeis guinnensis*) y 10 de control (Solución Salina). En el sitio de administración no se encontró eritema o edema en los animales de ambos grupos. Todos los animales tuvieron ganancia en peso y no se presentaron signos clínicos. No se presentaron afectaciones en el sitio de administración, no signos clínicos de irritación o daño, no perdieron peso por lo que se determinó la no presencia de reacciones de sensibilización.



**PRODUCTOS NATURALES REGISTRADOS EN LA ÚLTIMA DÉCADA. EXPERIENCIA DEL CENTRO DE INVESTIGACIÓN Y DESARROLLO DE MEDICAMENTOS (CIDEM).**

Ayadamis Martín Sosa, Nilia de la Paz Martín-Viaña, Caridad Margarita García Peña, Addis Bellma Menéndez, Marilyn López Armas, Vivian Martínez Espinosa. Centro de Investigación y Desarrollo de Medicamentos (CIDEM), Ave. 26 # 1605, Nuevo Vedado, La Habana, Cuba, Teléfono: (53)–7–881944 ext 144, [ayadamis.martin@cidem.cu](mailto:ayadamis.martin@cidem.cu).

En el Centro de Investigación y Desarrollo de Medicamentos (CIDEM) se han cultivado e investigado más de 180 variedades de plantas. Su experiencia en el estudio de las mismas ha permitido su uso como materia prima de una gama de productos terminados que se presentan en distintas formas farmacéuticas. Todos con la documentación necesaria para la obtención del registro sanitario como: medicamentos, nutracéuticos y cosmecéuticos. En este trabajo se ofrece una panorámica del comportamiento de los registros sanitarios otorgados a los productos naturales desarrollados en el CIDEM. Se realizó un estudio descriptivo y retrospectivo a partir de los procedimientos de trabajo implantados, los cuales están acorde con los requisitos vigentes en las agencias reguladoras, teniendo en cuenta los datos registrados en los registros en uso. En el período estudiado se han registrado 35 productos a partir de plantas medicinales: 15 en el CECMED y 20 en el INHEM. Se han cancelado 9, la mayoría del CECMED. Quedando en la actualidad 26 productos registrados: 11 medicamentos, 12 cosmecéuticos y 3 nutracéuticos de los cuales 2 tienen realizado ensayo clínico. De los productos registrados 8 están en el cuadro básico de productos naturales desde el 2015. Los registros de los productos del CIDEM de origen natural han aumentado, propiciando así el aumento en la producción y comercialización de los mismos en el país y el incremento de estos productos en el cuadro básico respondiendo a la política trazada en el lineamiento 158 del VI Congreso del Partido comunista de Cuba.

---

**CARTELES.****LC-MS-BASED SCREENING OF EAST INDIAN SANDALWOOD OIL (EISO) FOR ANTITUBERCULAR AND ANTIPLASMODIAL MECHANISMS OF ACTION.**

Thankhoe A. Rants'o<sup>1</sup>, Mansour Alturki<sup>1</sup>, Corey Levenson<sup>2</sup>, [Angela I. Calderón](#)<sup>1</sup>. <sup>1</sup>Department of Drug Discovery and Development, Harrison School of Pharmacy, 4306B Walker Building, Auburn University, Auburn, AL 36849; <sup>2</sup>Santalís Pharmaceuticals, 18618 Tuscany Stone, Suite 100, San Antonio, TX 78258, USA. [aic0001@auburn.edu](mailto:aic0001@auburn.edu).

EISO displayed antimycobacterial and antiplasmodial activities through unknown mechanisms. The goal of this study is to determine whether EISO exerts these by inhibiting enzymatic targets *Mycobacterium tuberculosis* shikimate kinase (*MtSK*) and *Plasmodium falciparum* thioredoxin reductase (*PfTrxR*) utilizing ESI-QTOF LC-MS-based functional assay approach. *MtSK* catalyzes the ATP-dependent [phosphorylation](#) of [shikimate](#) to shikimate-3-phosphate (S3P) in the shikimate pathway responsible for aromatic amino acids biosynthesis. *PfTrxR* catalyzes reduction of thioredoxin disulfide (Trx-S<sub>2</sub>) to thioredoxin dithiol (Trx-(SH)<sub>2</sub>) essential for antioxidant defense of the parasite. *MtSK*-inhibitory assay was carried out using a phenyl-hexyl 4.6x100mm,3.5 μm column with a gradient mobile phase of 0.1% formic acid (FA) in water and acetonitrile. Direct inhibition of S3P production was monitored through relative peak areas by LC-MS. EISO at 0.01% v/v in Tween-20 displayed 60% *MtSK* inhibition with IC<sub>50</sub> of 0.015% v/v. EISO *PfTrxR*-inhibitory activity was evaluated using a Zorbax 300SB-C8 column, 2.1x100mm,3.5 μm and a gradient mobile phase of 0.1% FA in water and 0.1% FA in acetonitrile. Inhibition of Trx-(SH)<sub>2</sub> formation was monitored by LC-MS. To distinguish the two forms of thioredoxin, known major *m/z* values of multiply-charged protein envelope in the Trx-(SH)<sub>2</sub> spectrum were deconvoluted to a product protein at a mass 11675.8711 Da and used for relative quantitation by displaying its extracted ion chromatogram. Major *m/z* values for the substrate Trx-S<sub>2</sub> were deconvoluted at the mass 11673.9204 Da. The 0.01% EISO in Tween-20 showed 90% *PfTrxR* inhibition. This study reports LC-MS-based screening of EISO and its inhibitory activity on *MtSK* and *PfTrxR*.



ESTUDIO PRELIMINAR DE LA ACTIVIDAD ANTIMICROBIANA DE EXTRACTOS PEPTÍDICOS DE SEMILLAS DE *Moringa oleifera* L.

Juan Abreu Payrol (1), Walter David Obregón (2), Santiago Pablo Claver (2), Juliana Cotabarren (2). (1) Instituto de Farmacia y Alimentos, Universidad de La Habana, La Habana, Cuba; (2) Centro de Investigación en Proteasas Vegetales (CIPROVE), Facultad de Ciencias Exactas, Universidad Nacional de La Plata, La Plata, Argentina. [jabreu@ifal.uh.cu](mailto:jabreu@ifal.uh.cu).

Las proteínas antimicrobianas (PA), tales como proteasas e inhibidores de proteasas (IPs), entre otras, son componentes cardinales de inmunidad innata, constituyendo un mecanismo de defensa antiguo encontrado en organismos diversos, incluso microorganismos, artrópodos, plantas y animales, dadas sus actividades antibacterianas, insecticidas e incluso antiparasitarias. También están cobrando gran importancia ya que, además de su papel nutricional por ser fuente de aminoácidos, son capaces de ejercer diferentes efectos biológicos específicos sobre el sistema inmune, el sistema cardiovascular o el tracto gastrointestinal, pueden también tener efectos anticancerígenos o antivirales. Por este motivo se amplía el estudio de nuevas biomoléculas de origen natural que tengan potencial aplicación en los distintos campos citados. Se evaluaron extractos peptídicos de semillas de *Moringa oleifera*, conteniendo proteasas e IPs, contra cepas de *Escherichia coli*, *Pseudomonas aeruginosa*, *Enterococcus faecalis*, *Salmonella thypi*, *Staphylococcus aureus* y *Candida albicans*. Los extractos de *Moringa oleifera* mostraron actividad versus *Escherichia coli*, *Salmonella thypi*, *Enterococcus faecalis* y *Staphylococcus aureus*, particularmente mostró una actividad superior al patrón de vancomicina (30 µg) contra *Salmonella thypi* y *Staphylococcus aureus*. Los resultados obtenidos confirman la posible presencia de PAs con actividad potencialmente útil en las semillas *Moringa oleifera*, que requieren de estudios más profundos y completos. Estos extractos no fueron efectivos contra levaduras.

COMPARACIÓN QUÍMICA EN HOJAS Y TALLO DE *Cupressus sempervirens* ("CIPRÉS") DE ORIGEN CUBANO.

Eva Salas Olivet<sup>1</sup>, Armando Cuéllar Cuéllar<sup>1</sup>, José González Yaque<sup>1</sup>, Lidia C. Díaz Fernández<sup>1</sup>, Chavelys López Torres<sup>1</sup>, Bárbara González D.<sup>2</sup>. 1. Instituto de Farmacia y Alimentos. Universidad de la Habana. La Habana. Cuba; 2. Laboratorio Central de Farmacología de la Facultad de Ciencias Médicas Salvador Allende. [evaso@ifal.uh.cu](mailto:evaso@ifal.uh.cu).

La especie *Cupressus sempervirens* (ciprés) pertenece a las familias de los cupresáceas, presenta una cultura milenaria y enigmática de tradiciones de inmortalidad al existir ejemplares con más de 1000 años de longevidad, es originario de las zonas del mediterráneo y en Cuba son muy escasos. Tiene la propiedad casi exclusiva de poder concentrar y vincular metabolitos secundarios y sales minerales, las que tributan a su uso popular a nivel mundial y múltiples aplicaciones en diferentes esferas económicas y medicinales; por estas razones el objetivo del presente trabajo es comparar los componentes químicos de hojas y tallo del ciprés cubano con los indicados de ciprés de otras partes del mundo. Se aplicó el método de maceración para la extracción de sus constituyentes químicos con disolventes de polaridad creciente y se identificaron cualitativamente por tamizaje fitoquímico, aludiendo con mayor incidencia aceites esenciales, grasas, alcaloides, resinas, azúcares reductores, flavonoides, compuestos fenólicos, mucílagos, principios amargos, triterpenoides y esteroides. Se realizó cromatografía líquida de alta resolución con sistema de elución isocrático agua/acetonitrilo con una columna C-18, donde se identificaron 44 componentes, los picos más significativos de los extractos hidro-alcohólicos de hojas y de tallo tuvieron diferente tiempo de retención entre ellos, lo que asevera que la planta contiene metabolitos secundarios específicos en tallo que no están en hojas y viceversa, los resultados en su conjunto demuestran que los metabolitos de la especie cubana son similares a los encontrados en extractos de ciprés de otras latitudes del mundo.

COMPARACIÓN DE COMPONENTES QUÍMICOS DE SEMILLAS DE *Chenopodium quinoa* W. Y DE *Sesamun indicum* L.

Eva Salas Olivet<sup>1</sup>; Lidia C. Díaz Fernández<sup>1</sup>; Lázara Milán<sup>2</sup>; Beatriz Tamargo Santos<sup>1</sup>; Armando Cuéllar Cuéllar<sup>1</sup>. 1. Instituto de Farmacia y Alimentos, Universidad de La Habana, Cuba; 2. LIORAQ. Polo Científico. La Habana. Cuba. [evaso@ifal.uh.cu](mailto:evaso@ifal.uh.cu).

La planta *Chenopodium quinoa* W. (quinua) es originaria de los Andes. Aunque se utiliza desde hace más de mil años, en la actualidad es objeto de estudio en varias investigaciones científicas por las propiedades medicinales y nutricionales de los extractos de sus frutos, dentro de las que destacan reducción del riesgo de padecer enfermedades cardiovasculares, desórdenes neurodegenerativos y diabetes, además participa en la inhibición de procesos inflamatorios y la angiogénesis del tumor, interfiriendo en la promoción y progresión del cáncer. La planta *Sesamun indicum* L. (ajonjolí) es originaria de India y África, pero es muy consumida en varios lugares del mundo, en Cuba es muy empleada por sus propiedades nutricionales, en medicina natural y tradicional se utilizan los extractos de sus semillas para calmar la tos, como galactagogo y como enemagogo. Las semillas de ambas plantas son similares en cuanto a características morfológicas. El objetivo de este trabajo es comparar cualitativamente los componentes químicos de los extractos de semillas de quinua uruguaya y ajonjolí cubano. La extracción de los metabolitos secundarios de semillas se realizó utilizando el método de maceración, los metabolitos fueron identificados cualitativamente empleando tamizaje fotoquímico; en ambos se expresaron con mayor incidencia compuestos grasos, alcaloides, resinas, azúcares reductores, compuestos fenólicos, aminoácidos libres o aminas y mucílagos. En la quinua se identificaron compuestos con agrupamientos lactónicos, saponinas y principios amargos que estaban ausentes en el Ajonjolí, en cambio este último expresó triterpenos o esteroides y antocianidina no encontrados en la quinua.


**EVALUACIÓN FARMACOGNÓSTICA, FITOQUÍMICA Y ACTIVIDAD ANTIOXIDANTE DE *Guettarda calyptrata* A. Rich.**

Ramón Scull Lizama<sup>1</sup>, Yamilet I. Gutiérrez Gaitén<sup>1</sup>, Zuleira Ocanto Torres<sup>2</sup>, José Luis Mayoral Jiménez<sup>3</sup>, Alejandro Felipe González<sup>1</sup>. <sup>1</sup>Instituto de Farmacia y Alimentos. Universidad de La Habana. La Habana. Cuba; <sup>2</sup>EPB “Carlos J. Finlay”. Infanta y Manglar. La Habana. Cuba; <sup>3</sup>UEB Suchel Fragancia. Departamento Técnico. La Habana. Cuba. [rscull@ifal.uh.cu](mailto:rscull@ifal.uh.cu), [yamiletgg@ifal.uh.cu](mailto:yamiletgg@ifal.uh.cu)

***Guettarda calyptrata* A. Rich.**, originaria de [Cuba](#) y conocida como Contraguao, se ha utilizado tradicionalmente para contrarrestar de forma rápida y eficaz los efectos tóxicos de *Comocladia dentata* Jacq. (Guao), especie vegetal que segrega un látex altamente cáustico para [piel](#) y [mucosas](#). El daño oxidativo causado por radicales libres está relacionado con una amplia gama de enfermedades y desórdenes, incluyendo la causticación. Con el propósito de ofrecer aspectos relacionados con la calidad y efectividad de la planta, se presenta su estudio farmacognóstico, fitoquímico y la actividad antioxidante. Se realizó la evaluación morfoanatómica, se determinaron parámetros físico-químicos a la droga cruda y a los extractos (acuoso e hidroalcohólicos). Se estimó el perfil químico de los extractos por cromatografía en capa delgada, espectroscopía ultravioleta-visible e infrarroja, así como cuantificación de fenoles totales por Folin-Ciocalteu y flavonoides totales por el método colorimétrico del tricloruro de aluminio. Finalmente, se ensayó la actividad antioxidante por las técnicas FRAP y DPPH. Mediante el estudio farmacognóstico se establecieron las especificaciones de calidad de la droga y sus extractos. Los métodos de análisis utilizados para el perfil químico sugirieron la presencia de flavonoides y fenoles en general, encontrándose diferencias en el contenido de dichos compuestos. Los extractos manifestaron propiedades antioxidantes por los dos métodos evaluados; la mayor actividad se obtuvo para el extracto hidroalcohólico al 80 %. El estudio de ***G. calyptrata*** brindó evidencias farmacognósticas, fitoquímicas y de efectividad como antioxidante, aspectos a considerar en el posible uso de la planta por nuestra Medicina Natural y Tradicional.

PARÁMETROS FARMACOGNÓSTICOS DE *Murraya paniculata* L. (Jack) Y PROPUESTA DE UN GEL ANTIINFLAMATORIO.

Yamilet I. Gutiérrez Gaitén<sup>1</sup>, Noel Varona Torres<sup>2</sup>, Ramón Scull Lizama<sup>1</sup>, Celia Casado Martín<sup>3</sup>, Arturo Sánchez Fariñas<sup>1</sup>, Gastón García Simón<sup>1</sup>. <sup>1</sup>Instituto de Farmacia y Alimentos. Universidad de La Habana. La Habana. Cuba; <sup>2</sup>UEB NOVATEC. La Habana. Cuba; <sup>3</sup>Laboratório de Farmacognosia. Departamento de Princípios Ativos Naturais e Toxicologia, Faculdade de Ciências Farmacêuticas. Universidade Estadual Paulista (UNESP). Brasil. [yamiletgg@ifal.uh.cu](mailto:yamiletgg@ifal.uh.cu), [ygutierrez@infomed.sld.cu](mailto:ygutierrez@infomed.sld.cu)

*Murraya paniculata* es muy difundida en Cuba y empleada en algunas regiones para el alivio del dolor y la inflamación asociados a enfermedades osteomioarticulares. El uso dado a la planta implica el empleo de la tintura al 20 % de las hojas frescas en fricciones con finalidad de fitofármaco, pero no se presentan estudios que respalden la factibilidad del empleo de la droga seca en el desarrollo de formulaciones semisólidas. En este sentido, se evaluaron los parámetros farmacognósticos a 12 lotes de droga seca y se estandarizó la tintura al 20 %. Se determinaron los índices físico-químicos de calidad, control microbiológico, tamizaje fitoquímico, cromatografía en capa delgada, cromatografía gaseosa-espectrometría de masas, contenido de L-prolina y se efectuó estabilidad en estante por dos años. Se elaboró un gel a partir de la tintura, se le evaluaron parámetros físico-químicos, tecnológicos y microbiológicos, se realizó una prueba de aceptación, así como toxicidad aguda dérmica y un estudio antiinflamatorio. Se establecieron los principales parámetros farmacognósticos de la droga seca y la tintura, permitiendo proponer un proyecto de norma de control de la calidad. La formulación diseñada mostró estabilidad durante 24 meses y fue aceptada por su olor, color, frescura y apariencia. La administración de forma aguda de la tintura y el gel, por vía tópica, no produjo efectos tóxicos en los animales de experimentación. Asimismo, ambos productos manifestaron un efecto antiinflamatorio bajo las condiciones ensayadas. Los resultados permitieron avalar la factibilidad del uso de la droga seca, con garantías de calidad, seguridad y efectividad.

DETERMINACIÓN DEL PERFIL DE ÁCIDOS GRASOS EN EL ACEITE DE HÍGADO DE TIBURÓN.

Caridad Margarita García Peña<sup>1</sup>, Mirna Fernández Cervera<sup>2</sup>, Yoanly Sanz Pedraja<sup>1</sup>, Vivian Martínez Espinosa<sup>1</sup>, Antonio Nogueira Mendoza<sup>1</sup>, Mirta Castiñeira Díaz<sup>2</sup>. <sup>1</sup>Centro de Investigación y Desarrollo de Medicamentos (CIDEM). Ave 26 No. 1605 e/ Boyeros y Puentes Grandes. Plaza de la Revolución. La Habana. Cuba; <sup>2</sup>Instituto de Farmacia y Alimentos, Universidad de La Habana, Cuba. [caridadgp@infomed.sld.cu](mailto:caridadgp@infomed.sld.cu); [caridad.garcia@cidem.cu](mailto:caridad.garcia@cidem.cu).

El aceite de hígado de tiburón es considerada una materia prima de origen natural para el desarrollo de formulaciones farmacéuticas, el mismo presenta en su composición química ácidos grasos, vitaminas, escualeno, entre otros. Por lo que nos trazamos como objetivo evaluar el perfil de ácidos grasos en diferentes variantes de aceite de hígado de tiburón, aceite microencapsulado, nanoencapsulado y en el producto terminado, empleando la cromatografía gaseosa. Para la determinación del contenido de ácidos grasos se emplearon dos métodos por CG/MS, además de realizarse el análisis por CG convencional. Para uno de los análisis por CG/MS se empleó el BSTFA, mientras que para los dos restantes de empleó otra metodología utilizando el trifluoruro de Boro. Los resultados obtenidos en los tres estudios para las seis muestras evaluadas coinciden entre sí, evidenciándose la presencia de ácidos grasos, y como componente mayoritario el ácido palmítico. Se determinó que el ácido palmítico es el ácido graso mayoritario presente en el aceite de hígado de tiburón.



NEW PHYTOCHEMICAL PROFILE OF ETHANOLIC EXTRACT FROM *Talipariti elatum* (SW.) IN CUBA.

José González Yaque<sup>1</sup>, Armando Cuéllar<sup>1</sup>, Loik Sylvius<sup>2</sup>, Frédéric Verdeau<sup>2</sup>. <sup>1</sup>Department of Pharmacy, Faculty of Pharmacy and Foods, Havana University, Cuba; <sup>2</sup>Laboratory BIOSPHERES of FWI University (UA), Martinica. [jgyaque@ifal.uh.cu](mailto:jgyaque@ifal.uh.cu)

Genus *Talipariti* has long history of use in various traditional medicine and therapeutic applications in Cuba, especially in treatment of bronchial asthma and flu. Petals of genus *Talipariti* are rich source of secondary metabolites and most of these metabolites are reported to possess expectorant, antasthmatic, appetitive, antioxidant and antibacterial properties. In our study, high performance liquid chromatography with diode array detector coupled with electrospray ionization mass spectrometry (HPLC-DAD-ESI-MS/MS) method was established for simultaneous identification of flavonoids and other constituents in the petals of the flowers of *Talipariti elatum* (Sw.) Fryxell growing in Cuba. About eleven compounds were identified in this specie based on chromatography retention time (tR), UV and MS/MS spectra and compared with those of isolated authentic compound and literature data. About eighth constituents were reported for the first time from *Talipariti elatum*. Our results demonstrate the developed method could be employed as a rapid and versatile analytical technique for identification of chemical constituents and quality control of the ethanolic extracts from *Talipariti elatum*.

DETERMINACIÓN DEL BALANCE HIDRÓFILO LIPÓFILO DEL ACEITE DE MORINGA.

Olga María Nieto Acosta, Ofelia Bilbao Reboredo, Cynthia Gema Martínez Vera, Jorge David Fundora Nieto. Instituto de Farmacia y Alimentos (IFAL), Universidad de La Habana (UH). Calle 222, No. 2317, entre 23 y 31, La Coronela, La Lisa, CP 13600. La Habana, Cuba. [omn@ifal.uh.cu](mailto:omn@ifal.uh.cu).

El aceite de la semilla de Moringa oleífera Lam contiene un importante perfil de nutrientes, en especial de ácidos grasos, por lo que su incorporación en productos cosméticos es una excelente alternativa con el propósito de mejorar la nutrición, hidratación y emoliencia de la piel. El objetivo de este trabajo fue determinar el Balance Hidrófilo-Lipófilo necesario (HLBn) para este aceite, que permita utilizarlo como componente de la fase oleosa de una emulsión, y poder emplearlo con su valor de HLBn para escoger adecuadamente el o los emulgentes necesarios para estabilizar una crema tipo emulsión. Se determinó el Equilibrio de Inversión de Fase (EIP) con el aceite de moringa y se comprobó que el ensayo que menor cantidad de mililitros (ml) de H<sub>2</sub>O consumió para la emulsificación del aceite fue el que contenía 0,9 g de Monoestearato de sorbitán (Span 60) y 0,1 g de Polisorbato 80 (Tween 80). Con los valores obtenidos para los emulgentes se calculó el HLBn obteniendo un valor de 5,7 (no reportado en la literatura revisada). Con este nuevo dato se utilizó el aceite extraído de la semilla de moringa como sustancia activa en el estudio de preformulación de una crema cosmética: el resultado del análisis organoléptico fue satisfactorio; área de extensibilidad de 86,90 y 74,09 cm<sup>2</sup>; adecuada estabilidad termodinámica a través de dos pruebas de estrés; pH de 6,88 (con trietanolamina) y 6,31 (con solución alcalina 10%); buena viscosidad, y cumplió con los límites microbianos para la aceptación de cosméticos.

MODELACIÓN COMPUTACIONAL.

**PRESENTACIONES ORALES.**

**PREDICCIÓN DE LA SOLUBILIDAD EN AGUA DE COMPUESTOS DE INTERÉS FARMACÉUTICO.**

Yisselys Ponte<sup>2</sup>, Luis A Torres<sup>1</sup>, Juan Carlos Polo<sup>1</sup>. 1 Instituto de Farmacia y Alimentos. Universidad de la Habana, Cuba; 2 Empresa LABIOFAM, Cuba. [luistg@ifal.uh.cu](mailto:luistg@ifal.uh.cu).

En el trabajo se llevó a cabo un estudio de Relación Estructura Propiedad (QSPR), con el objetivo de obtener un modelo matemático que permita estimar la solubilidad de compuestos orgánicos en agua a 25°C a partir de una serie de 194 compuestos con los que se ha conformado una base de datos. Se calculan 106 descriptores moleculares empleando una aproximación MODESLAB, usando diferentes parámetros de naturaleza electrónica y estérica como criterios de ponderación y formas de codificar la información estructural; en el modelo que permite la estimación de la solubilidad se logra un coeficiente de determinación de 0.96, el mismo fue validado mediante validación cruzada y el empleo de una serie de predicción externa conformada por 20 compuestos a los que se le conoce la solubilidad, obteniéndose en este caso un coeficiente de correlación de 0.98. se comparó y demostró la superioridad de los resultados obtenidos con estudios precedentes empleando otras metodologías de cálculo.

CONFIRMATIONAL STUDY OF THREE NOVEL ANDROSTANE-[60]FULLERENE HYBRIDS.

David Hernández-Castillo<sup>(a)</sup>, Margarita Suarez-Navarro<sup>(b)</sup>. <sup>(a)</sup> Laboratory of Computational and Theoretical Chemistry, Faculty of Chemistry, University of Havana, Zapata e G y Mazón, CP 10400, Havana, Cuba. <sup>(b)</sup> Organic Syntesis Laboratory, Faculty of Chemistry, University of Havana, Zapata e G y Mazón, CP 10400, Havana, Cuba. [david.hdez.castillo@gmail.com](mailto:david.hdez.castillo@gmail.com)

The synthesis of hybrid molecules by the covalent linkage of steroids to fullerene is an actual important topic, and nowadays is a common approach in the pursuit of interesting biomedical and chemical applications, with the purpose of enhancing the therapeutic properties of fullerene itself, or for the advantage of the great variety of different biological functions that steroids display. The union of these two entities has allowed these conjugates to be more soluble than pristine [60]fullerene in aqueous medium and in organic solvents, and not only may modulate the properties of each one of them, but also could allow chimeric molecular entities with completely new properties and functions to be produced. However, most of the biomedical and other further applications of this hybrids are highly dependent on the final conformation adopted.

In this work a detailed conformational analysis of three recent synthetized androstane-[60]fullerene hybrids is performed. A total of 2000 possible conformational rearrangements were studied for the three structures. A general methodology, for this kind of studies is proposed on the basis of our results, taking into account the experimental available information. In general, our methodology involved: random conformational sampling, combination of semi-empirical and DFT geometry optimization, geometry similarity analysis using the Tanimoto index and thermodynamic Boltzmann population analysis. We also walk through the influence of adding (or not) dispersion-corrections computing this type of chemical hybrids. We hope this strategy will allow the elucidation of the possible applications of fullerene hybrids.

**PRONOSTICOS DE LA MULTIRRESISTENCIA ANTIMICROBIANA DE LAS CEPAS DE *E. coli*, *C. freundii*, *P. agglomerans* EN LAS ITU.**

Oscar Guillermo Collado García<sup>1</sup>, Guillermo Antonio Barreto Argilagos<sup>2</sup>, José Alberto Bertot Valdés<sup>3</sup>. <sup>1</sup> Dpto. de Química. Facultad de Ciencias Aplicadas. Universidad de Camagüey "Ignacio Agramonte Loynaz". Camagüey. Cuba; <sup>2</sup> Dpto. de Alimentos. Facultad de Ciencias Aplicadas. Universidad de Camagüey "Ignacio Agramonte Loynaz"; <sup>3</sup> Dpto. de Veterinaria. Facultad de Ciencias Agropecuarias. Universidad de Camagüey "Ignacio Agramonte Loynaz". [oscar.collado@reduc.edu.cu](mailto:oscar.collado@reduc.edu.cu)

Las infecciones del tracto urinario (ITU) constituyen un importante problema de salud que afecta a millones de personas cada año, estando en el orden de los 150 millones. En el presente estudio pronosticamos el comportamiento de la multirresistencia tres especies bacterianas aisladas en las infecciones del tracto urinario en una población de pacientes comunitarios y hospitalarios en pacientes en Camagüey. Se realizó un estudio retrospectivo con los datos de la realización de urocultivos en el hospital Amalia Simoni de la ciudad de Camagüey entre los años 2004-2011. Se estimaron los porcentajes de resistencia para el quinquenio 2016-2020. Las variables consideradas fueron: año, área de salud, especie bacteriana. Se confeccionó de una Base de Datos en Microsoft Excel. Paquete Microsoft Office Professional Plus 2010. El análisis estadístico se desarrolló con el paquete SPSS versión 15.0 (2006). Las tres especies uropatógenas más frecuentes que se presentaron fueron: *E. coli* (53,5%), *C. freundii* (13,5 %) y *P. agglomerans* (12,9 %) y justifican el 79,9 % de los aislamientos de las ITU. Se presentaron y estimaron elevados porcentajes de multirresistencias a los antimicrobianos utilizados en el tratamiento de las ITU hospitalarias y comunitarias, siendo más elevados en el hospital, con lo cual se propone reevaluar el protocolo de tratamiento antimicrobiano frente a estas especies bacterianas. En el hospital resultan importantes los patrones de elevados porcentajes de multirresistencia a las quinolonas, a cuatro cefalosporinas así como a los antimicrobianos orales, comportamiento similar en la comunidad con la Nitrofurantoína como excepción.

MODELACIÓN MULTIVARIADA DE LA ACTIVIDAD ANTICOAGULANTE EMPLEANDO LA METODOLOGÍA MODESLAB.

Luis A Torres Gómez<sup>1</sup>, Laura Machin. <sup>1</sup>Instituto de Farmacia y Alimentos, Universidad de La Habana, Cuba. [lulistg@ifal.uh.cu](mailto:lulistg@ifal.uh.cu).

En el trabajo se emplea la metodología de cálculo con el MODESLAB a la modelación de la actividad anticoagulante de diferentes fármacos. Para esto se realizó el cálculo de los momentos espectrales de la matriz de adyacencia entre aristas del grafo molecular con hidrógenos suprimidos, ponderada en la diagonal principal con diferentes parámetros a 985 compuestos entre activos e inactivos. Los descriptores calculados fueron usados en una serie de entrenamiento y otra de predicción para obtener y evaluar el modelo respectivamente. Con la serie de entrenamiento se desarrolló una función discriminante para la actividad anticoagulante obteniéndose una buena clasificación total de 92.29 %. El modelo fue validado mediante el uso de una serie de predicción externa con un total de 146 compuestos, obteniéndose una buena clasificación total de un 95.89 %. Se determinó la contribución de enlaces a la actividad (análisis subestructural), De esta forma se obtuvieron las zonas de iso-contribución positiva o farmacóforas, y las zonas de iso-contribución negativa, que pueden actuar como grupos transporte para las moléculas analizadas, lo cual nos da una idea de las regiones que pueden interactuar con un receptor determinado, así como aquellas que facilitan la llegada del fármaco al sitio de acción.

THEORETICAL EVALUATION OF FAMILY 18F-N-ETHOXY-METHYL-TRIAZOLE LOSARTAN AS RADIOPHARMACEUTICAL CANDIDATES FOR CANCER DIAGNOSIS.

García A<sup>1</sup>, Martínez A<sup>1</sup>, Álvarez Y<sup>2</sup>, Rodríguez Z<sup>1</sup>, Jáuregui U<sup>1</sup>. 1- Instituto Superior de Tecnologías y Ciencias Aplicadas, Universidad de La Habana, Ave. Salvador Allende No. 1110, P.O. Box 6163, Plaza de la Revolución, 10400 La Habana, Cuba; 2- Facultad de Química, Universidad de La Habana, Zapata s/n entre G y Carlitos Aguirre, Vedado, Plaza de la Revolución, 10400 La Habana, Cuba. [ulises.jauregui@infomed.sld.cu](mailto:ulises.jauregui@infomed.sld.cu).

The radiotracers are essential for imaging procedures in research and diagnosis. They are increasingly used to examine the trafficking patterns of cells transferred into recipient models of diseases, to optimize immune cell therapies, and to assess cancer gene therapy and vaccines in various cancer models. In this study, the losartan and its FEM derivatives (Fluoro n-ethoxy-methyl-triazole losartan, n=0-3) were studied as potential candidates of radiopharmaceuticals for cancer diagnosis. The stability and association of four FEM to the AT<sub>1</sub> receptor was evaluated. The Density Functional Theory (DFT) with the base 6-31G (2d, 2p) was used to evaluate radiotracers stability. In order to determine the functional that provides a better description of FEM, the experimental X-ray diffraction structure of losartan potassium was compared with calculated using different functionals. The functional M06-2X resulted the most suitable with the lowest associated errors and the highest correlation coefficient of estimation. The frequency calculation of the FEM structures and the bond dissociation energy (BDE) were obtained for each derivative. In both vacuum and water calculations, the stability of compounds decreased following the order: FTEMT(n = 3) > FDEMTL(n = 2) > FMTL (n = 0) > FEMTL(n = 1). When water as implicit solvent was considered in the model, the difference of BDE was only 6KJ/mol. The electron density analysis of atoms in molecules was performed in order to characterize the intramolecular interactions in each FEM derivative. There was an increase of Van der Waals type interactions with the increase of the long of chain, being the FDEMTL the only one with two hydrogen bonds. Molecular Docking (MD) study was performed in order to evaluate the interactions of the four FEM with the receptor. All derivatives evaluated have an interaction energy with the receptor similar to the losartan. The FMTL derivative can be considered the best candidate as radiotracer.



ANÁLISIS COMPUTACIONAL DE LAS ENERGÍAS DE INTERACCIÓN DEL HIF-2 $\alpha$ / HIF-1 $\beta$  PARA EL DISEÑO DE NEM.

Oscar G. Collado García<sup>1</sup>, Glay Chinae Santiago<sup>2</sup>, Enrique Molina Pérez<sup>3</sup>. <sup>1</sup> Dpto. Química. Facultad de Ciencias Aplicadas. Universidad de Camagüey "Ignacio Agramonte Loynaz" y CIGB-Habana. Camagüey. Cuba. <sup>2</sup> Dpto. Biología de sistemas. División de Investigaciones Biomédicas. Centro de Ingeniería Genética y Biotecnología (CIGB). La Habana. Cuba. <sup>3</sup> Dpto. Química. Facultad de Ciencias Aplicadas. Universidad de Camagüey "Ignacio Agramonte Loynaz". [oscar.collado@reduc.edu.cu](mailto:oscar.collado@reduc.edu.cu) , [oscar.collado@cigb.edu.cu](mailto:oscar.collado@cigb.edu.cu)

El rápido crecimiento de los tumores genera zonas de hipoxia en el interior de la masa tumoral. La hipoxia resultante activa al HIF-2 $\alpha$ , que dimeriza con el factor HIF1 $\beta$  y pone en marcha toda la familia de genes angiogénicos, lo cual conduce al aumento de la densidad y permeabilidad vascular así como el crecimiento y propagación del tumor. La estructura cristalográfica del complejo HIF-2 $\alpha$ / HIF-1 $\beta$  de ratón ha sido determinada por difracción de rayos-X. El objetivo de nuestro trabajo es caracterizar por medio de herramientas computacionales las interfaces de interacción del dominio de dimerización del HIF-2 $\alpha$  / HIF-1 $\beta$  como diana terapéutica potencial para el diseño de fármacos antitumorales. Los residuos de la interfase de interacción en los complejos fueron determinados con el servidor Cocomaps (<https://www.molnac.unisa.it/BioTools/cocomaps/>). Los cálculos de las energías de interacción y la modelación de la estructura de mutantes de alanina se realizaron utilizando los servidores Robetta (<http://rosetta.bakerlab.org/alascansubmit.jsp>) y Rosetta Backrub (<https://kortemmelab.ucsf.edu/backrub/cgi-bin/rosettaweb.py?query=submit>). Se identificaron los residuos importantes (de mayor aporte energético) para la interacción de los dímeros HIF-2 $\alpha$ / HIF-1 $\beta$ . En todos los casos los residuos importantes forman parches continuos en la superficie de las proteínas, formados por entre tres y nueve residuos dependiendo de los dominios interactuantes. El dominio central PAS-A es el que más residuos importantes aporta a la interacción. Los residuos identificados pueden servir de base para la identificación de sitios de unión potenciales para el trabajo de diseño computacional de inhibidores de la dimerización del factor HIF.



DESARROLLO DE UNA NUEVA LÍNEA DE TÉ A PARTIR DE *Allophylus cominia* (L) Sw Y

*Mangifera indica* L.

Ayalenis Boris Garbey, Lorena Safonts Grenier, Lyanne Rodríguez Pérez, Yudsimí Hernández Oliva, Yudit Rodríguez Coipel. Empresa GENIX-LABIOFAM. Inmobiliaria Siboney-Palco. Calle 1<sup>ra</sup> # 2010 e/ A y B, Piso 10 Bloque A. Vedado. Plaza de la Revolución. [desarrollo@genix.co.cu](mailto:desarrollo@genix.co.cu).

El uso de las plantas por parte del hombre, con fines alimenticios y curativos, es tan antiguo como el hombre mismo. Dentro de las especias estudiadas en las últimas décadas se encuentran la *Mangifera indica* L, con propiedades antioxidantes y el *Allophylus cominia* (L) sw con aplicación en el control del metabolismo de los lípidos. Teniendo en cuenta los aportes de estas especies vegetales, la Empresa Genix-LABIOFAM se dio a la tarea de desarrollar una línea Té dirigidos a combatir el estrés oxidativo y a los desórdenes metabólicos. Para el desarrollo de este trabajo, se procesó el material vegetal de acuerdo a los procedimientos establecidos. Se evaluaron los parámetros físico-químico como humedad, cenizas totales y fenoles, y los microbiológicos según NC 585-2015. Se realizó el estudio de estabilidad en vida de estante, y la evaluación de la toxicidad aguda oral a dosis límite (2000 mg/kg) según OECD N° 423. Los resultados físico-químicos y microbiológicos dieron conformes. Por lo que los Té almacenados en bolsas de nylon a  $30 \pm 2$  °C y  $70 \pm 5$  % HR fueron estables durante 12 meses, resultaron inocuos, y se lograron los registros sanitarios en el INHEM de: Vimang Té instantáneo, Vimang Té y Alofin Té.



**OBTENCIÓN DE UNA MEZCLA DE CURCUMINOIDES PARA SU UTILIZACIÓN COMO PATRÓN DE TRABAJO.**

Mislén Gómez Matos<sup>1</sup>, Lais Pérez Pérez<sup>1</sup>, Yenisleidy Revilla Fernández<sup>1</sup>, Maritza González Pérez<sup>1</sup>. <sup>1</sup> Laboratorio de Antianémicos y Nutracéuticos. Centro Nacional de Biopreparados (BioCen), Mayabeque, Cuba. [mislen.gomez@biocen.cu](mailto:mislen.gomez@biocen.cu).

La *Curcuma longa* L. es una planta de origen asiático cuyo rizoma es usado comúnmente como una especia. A la cúrcuma se le atribuyen muchas propiedades como actividad antimicrobiana, antiinflamatoria, anticancerígena, hepatoprotectora, antioxidante, entre otras. Entre los componentes de la cúrcuma se encuentran los carbohidratos (4,7 – 8,2 %), aceites esenciales (2,4 – 4,0 %), ácidos grasos (1,7 – 3,3 %) y curcuminoides (2,5 – 5,0 %), los cuales son los compuestos responsables de su actividad biológica. Este trabajo tiene como objetivo obtener una mezcla de curcuminoides que pueda ser utilizada como patrón de trabajo para monitorear los extractos de cúrcuma obtenidos en el laboratorio. Se realizaron extracciones con diferentes disolventes (n-hexano, metanol, acetona, etanol, agua, acetonitrilo, acetato de etilo y diclorometano) y a cada extracto obtenido se le realizó el espectro de absorción UV/Vis desde 200 a 540 nm. Posteriormente se realizó una extracción combinada primero con n-hexano y luego con acetona. A la luz de los resultados obtenidos se seleccionó la acetona como el disolvente más adecuado para obtener un patrón de trabajo de curcuminoides y se seleccionó el n-hexano para eliminar las impurezas. Mediante la extracción combinada n-hexano/acetona se obtuvo un extracto de curcuminoides con bajo contenido de impurezas.

ESTUDIO PRELIMINAR DE LA EXTRACCIÓN DE LICOPENO EN UN MEDIO OLEOSO.

Yanet Sariego Toledo, Gabriel Acosta Pozo, Beatriz Zumalacárregui, Luis Cruz Viera. Universidad Tecnológica de La Habana José Antonio Echeverría, Avenida 114 No. 11 901 entre Ciclovía y Rotonda, Marianao, CP: 19 390, La Habana, Cuba. [ysariego@quimica.cujae.edu.cu](mailto:ysariego@quimica.cujae.edu.cu).

El licopeno, al cual el tomate le debe su tonalidad roja, además de presentar grandes propiedades como colorante, es un poderoso antioxidante que ayuda a combatir enfermedades degenerativas. Debido a la importancia de esta propiedad, en el presente trabajo se realiza un estudio preliminar sobre la extracción sólido-líquido asistida por ultrasonido de licopeno proveniente de desechos de tomate de la industria conservera nacional, empleando como disolvente aceite de moringa. Para ello se realizó un diseño de experimento variando en tres niveles la temperatura (40, 55, 70°C) y la relación soluto-disolvente (1/30, 1/45, 1/60, m/v). Se desarrolló un estudio cinético de la operación para establecer el tiempo de extracción y la energía de activación del proceso. Se determinó el número de etapas de extracción a partir de la determinación del rendimiento de extracción. La temperatura constituyó la variable de mayor influencia. Las mejores condiciones para la extracción son 60°C y relación soluto-disolvente de 1/30. El proceso se corresponde con una cinética de primer orden y la energía de activación indica que la extracción es un proceso físico. El tiempo de extracción para una etapa fue de 65 minutos, correspondiendo un rendimiento de 85 %.



TRITERPENOS PENTACÍCLICOS CON RECONOCIDA ACTIVIDAD CITOTÓXICA AISLADOS DE PLANTA ENDÉMICA CUBANA.

Carlos Romeu Carballo<sup>1</sup>, Clara Nogueiras Lima<sup>2</sup>, Susana Y. Torres Nieto<sup>2</sup>, Armando Urquiola <sup>3</sup>. <sup>1</sup> UEB Laboratorios AICA, Ave 39 S/N entre 268 y 270, San Agustín, La Lisa, La Habana, Cuba, Teléfono 7-271-21-55 ext. 1053 ; <sup>2</sup> Dpto. Química Orgánica, Facultad de Química, Universidad de la Habana, Cuba; <sup>3</sup> Jardín Botánico de Pinar del Río, Cuba. [carlosr@aica.cu](mailto:carlosr@aica.cu).

*Maytenus urquiolae* Mory es un árbol endémico de Cuba perteneciente a la familia de las celastráceas. Fue descrito en 1993 por el Dr. Armando Urquiola en el municipio Mantua de la provincia de Pinar del Río. Las celastráceas son conocidas por su uso en la medicina tradicional especialmente en Asia y América Latina. Extractos de plantas de esta familia se han usado para tratar la artritis reumatoide, fiebres y más recientemente algunos tipos de cáncer. Tallos de *M. urquiolae* Mory secos y triturados se extrajeron con mezclas de n-hexano y éter etílico y se le aplicaron técnicas cromatográficas y espectroscópicas para aislar y caracterizar metabolitos mayoritarios. Se aislaron y caracterizaron los triterpenos pentacíclicos: 3-hidroxi-2,21-dioxo-D:A-friedo-24,29-dinorolean-1(10):3:5:7-tetraeno (tingenona) y 2,21-dioxo-3,15a,22b-trihidroxi-D: A-friedo-24,29-dinorolean-1(10):3:5:7-tetraeno (22 β-hidroxitingenona). Estudios in vitro reportan que la tingenona ha mostrado elevada citotoxicidad frente a líneas celulares de cáncer de pulmón mientras que la 22 β-hidroxitingenona ha sido efectiva frente a la leucemia y al cáncer de próstata. *M. urquiolae* es una especie endémica, fuente de metabolitos antitumorales.

IMPACTO CLÍNICO DE PRODUCTOS NATURALES DESARROLLADOS POR EL CENTRO DE INVESTIGACIÓN Y DESARROLLO DE MEDICAMENTOS.

Idrian García García<sup>1</sup>, Daise Jiménez Rodríguez<sup>1</sup>, Magnelis Machado Leiva<sup>2</sup>, Yolanda Rodríguez Cámara<sup>2</sup>, Tatiana Festary Casanovas<sup>1</sup>, Deydree Silveira Pacheco<sup>3</sup>. 1. Centro de Investigación y Desarrollo de Medicamentos (CIDEM), La Habana, Cuba; 2. Hospital Militar Central "Dr. Luis Díaz Soto", La Habana, Cuba; 3. Hospital Clínico Quirúrgico "Joaquín Albarrán". La Habana, Cuba. [Idrian.garcia@cidem.cu](mailto:Idrian.garcia@cidem.cu).

La utilización de las plantas medicinales en algunas enfermedades no siempre está respaldada por criterios basados en la evidencia. Los compuestos naturales deben ser evaluados en la clínica a través de ensayos clínicos que demuestren claramente su eficacia y seguridad en los pacientes tratados. El objetivo de este trabajo es mostrar los resultados del desarrollo clínico de los productos naturales obtenidos por el CIDEM y su posible impacto en la salud pública nacional. Se realizaron ensayos clínicos aleatorizados, controlados con placebo y a doble ciega donde se evaluó la eficacia de tabletas de *Plectranthus amboinicus* (Lour.) Spreng (Orégano francés) en pacientes con catarro común y de un extracto lipofílico microencapsulado de aceite de semillas de calabaza (Calprost®) en pacientes con Hiperplasia Prostática Benigna (HPB) con síntomas del tracto urinario bajo. Después de la primera semana de tratamiento, la frecuencia e intensidad de la tos fue significativamente menor en los pacientes tratados con la dosis mayor de orégano, aumentando la cantidad de expectoración. Por su parte, los pacientes tratados con Calprost® disminuyeron significativamente los síntomas a los tres meses de tratamiento, con mejor respuesta que la terazosina en la reducción de los volúmenes urinario residual y prostático. El porcentaje de eventos adversos presentados fue mayor con la terazosina. Los resultados obtenidos permiten dar respuesta a vacíos terapéuticos existentes en nuestro país con medicamentos de origen natural, producidos nacionalmente mediante tecnologías novedosas con un balance económico muy favorable.

PROPOSTA DE UN INGREDIENTE FARMACÉUTICO ACTIVO HERBARIO  
GASTRORRESISTENTE A PARTIR DE *Portulaca oleracea* L. (VERDOLAGA).

<sup>1</sup> Miguel Angel Alba de Armas, <sup>2</sup> Luis Alberto Torres Gómez, <sup>1</sup> Eliney Flores Acosta, <sup>1</sup> María Isabel de Armas Rodríguez. <sup>1</sup> Universidad Central de Las Villas. Santa Clara. Villa Clara. Cuba; <sup>2</sup> Instituto de Farmacia y Alimentos, Universidad de La Habana, Cuba. [malba@uclv.edu.cu](mailto:malba@uclv.edu.cu)

A la verdolaga se le atribuye acción hipocolesterolémica ya que reduce la absorción intestinal del colesterol por contener esteroides. En este trabajo se evaluó las características organolépticas, humedad residual, higroscopicidad y las propiedades químico - físicas y tecnológicas del sólido pulverulento (SP) de verdolaga. Se elaboraron seis variantes de granulados (SP al 30, 40, y 50 %) por el método tradicional (vía húmeda) utilizando para ello dos aglutinantes gastrorresistentes (dispersión acuosa de Eudragit L 30D-55 y Acetofalato de celulosa al 10 % en etanol-acetona 3:1). A los granulados se les evaluaron sus propiedades químico-físicas y tecnológicas. El granulado, con el SP al 50% y el Eudragit como aglutinante, se sometió a agitación en fluido gástrico y fluido intestinal simulado independientemente. Se obtuvo como resultados que el SP presenta color verde claro, olor característico, forma irregular de las partículas, un 8 % de humedad residual, deficientes propiedades reológicas y clasificó como muy higroscópico. Todas las variantes de granulados poseen propiedades químico-físicas y tecnológicas adecuadas. Se observó en fluido gástrico simulado una dispersión con sobrenadante transparente y en fluido intestinal simulado una dispersión con sobrenadante amarillo – carmelitosa. Se concluye que las variantes de granulados óptimas son aquellas donde se utiliza el Eudragit como aglutinante por presentar un diámetro promedio de partículas más cercano a 0,315 mm, una distribución normal de tamaño de partícula, mejores propiedades reológicas, resisten la acción del fluido gástrico y desintegran en fluido intestinal, menor riesgo de toxicidad y ser más económicas por el no empleo de solventes orgánicos.

ACTIVIDAD ANTIMICROBIANA DE QUITOSANA DERIVADA DE QUITINA DE LANGOSTA (Panulirus argus) Y SUS SALES.

Zoe Palazón López, Nilia de la Paz Martín-Viaña, Mirna Fernández Cervera, Caridad M. García Peña, Antonio Nogueira Mendoza, Orestes Darío López Hernández. Centro de Investigación y Desarrollo de Medicamentos (CIDEM). Ave. 26 # 1605 e/ Puentes Grandes y Boyeros. La Habana, Cuba; Instituto de Farmacia y Alimentos (IFAL). Universidad de la Habana. Calle 23 No. 21425 e/ 214 y 222, La Habana. Cuba; Universidad Técnica de Ambato, Ecuador. [zoe.palazon@cidem.cu](mailto:zoe.palazon@cidem.cu).

La quitosana es un polisacárido natural, biodegradable y biocompatible, que se obtiene principalmente a partir de la quitina, sustancia muy abundante en la naturaleza. La quitosana forma sales solubles en agua al reaccionar con ácidos orgánicos e inorgánicos. Debido a sus propiedades físico-químicas, se han identificado diversas aplicaciones que abarcan áreas como la alimentación, medicina, agricultura, cosmética, farmacia, entre otras. En el presente trabajo se evaluó la actividad antimicrobiana *in vitro* de la quitosana base, el acetato y el lactato de quitosana. Se empleó el método de difusión en agar y se determinó la concentración mínima inhibitoria y/o mínima microbicida frente a microorganismos de interés. Fue demostrado el potencial antimicrobiano de las sales del biopolímero, al observarse inhibición del crecimiento de los microorganismos probados. Los lotes investigados mostraron actividad antimicrobiana contra la *Cándida albicans*, *Staphylococcus aureus*, *Sacharomyces cerevisiae* y *Staphylococcus epidermides*. En cuanto a la concentración mínima inhibitoria de la quitosana base, se logró detener el crecimiento microbiano a los valores entre 0,14 y 2,5 mg/mL, no detectándose acción bactericida. Las sales mostraron comportamiento similar al de la base para el caso de las cepas de *Staphylococcus*, *E. coli* y las cepas de levaduras. La acción bactericida sólo se evidenció frente a las cepas del género *Micrococcus* donde los valores estuvieron entre 1,5 y 2,0 mg/mL.