

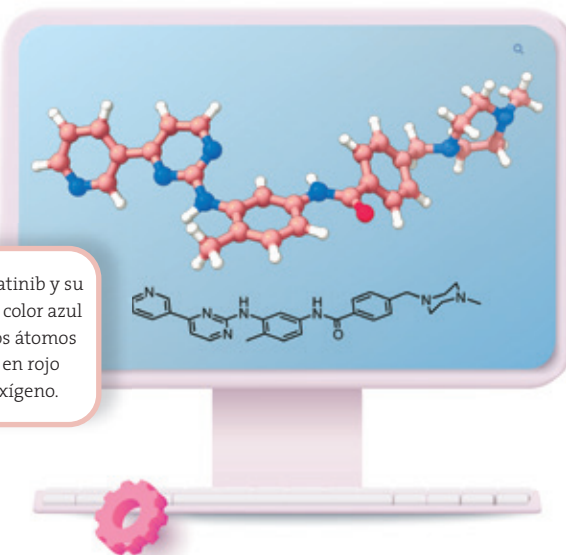
medios que nos permitan continuar el camino. Por eso es necesario buscar la ruta óptima que maximice la producción con el fin de reducir el costo del producto final.

Los obstáculos no acaban ahí. A veces las nuevas moléculas resultan químicamente inestables en condiciones ambientales y una vez purificadas se degradan, lo que causa no pocas frustraciones. Pero es fascinante que cambiar un solo átomo por otro, o simplemente modificar su posición, pueda dar un efecto completamente diferente.

De la computadora a la farmacia

Una vez sintetizada una nueva molécula, hay que probar su efecto en un sistema biológico: en ensayos preclínicos en células (*in vitro*) y animales (*in vivo*), y ensayos clínicos en humanos. Desarrollar un nuevo fármaco desde su diseño hasta su aprobación toma entre 10 y 15 años, un proceso de gran costo económico y humano, si además se toma en cuenta que solo se aprueba el 12% de los fármacos que llegan a la fase clínica.

Nicholas B. Lydon.



Estructura del imatinib y su imagen en 3D. En color azul se representan los átomos de nitrógeno y en rojo un átomo de oxígeno.

Aunque los resultados de los modelos computacionales solo son simulaciones —avatares de estructuras químicas que predicen cómo actuarían en la realidad—, el diseño de fármacos *in silico* gana cada día más terreno por ser una manera más rápida y certera de encontrar nuevos medicamentos con efectos específicos, menos tóxicos para el paciente, a menor costo e incluso menos dañinos para el ambiente. 🦋

Agradecemos al Dr. Jonathan Cueto Escobedo, al M. en C. Luis Ángel Luis Gil y a la Dra. Miriam Guadalupe Báez por sus aportaciones y comentarios, que enriquecieron este artículo.

i

- Prieto Martínez, Fernando y José L. Medina Franco, “Diseño de fármacos asistido por computadora: cuando la informática, la química y el arte se encuentran”, *TIP. Revista especializada en ciencias químico-biológicas*, México, 2020: https://www.scielo.org.mx/scielo.php?script=sci_arttext&pid=S1405-888X2018000200201.
- Scior, Thomas, Evelyn Martínez Morales y Eduardo Salinas Stefanón, “Los modelos *in silico*, una herramienta para el conocimiento farmacológico”, *Elementos: Ciencia y Cultura*, Benemérita Universidad Autónoma de Puebla, México, 2007: <https://elementos.buap.mx/index.php>.



Los autores son investigadores del Laboratorio de Diseño y Desarrollo de Nuevos Fármacos e Innovación Biotecnológica de la Escuela Superior de Medicina del Instituto Politécnico Nacional (IPN).

José Correa Basurto es médico, maestro en farmacología y doctor en investigación en medicina. Ha sido responsable técnico de proyectos nacionales e internacionales de diseño y desarrollo de fármacos y nanovacunas.

Humberto L. Mendoza Figueroa es doctor en farmacología. Desarrolla proyectos relacionados con la química medicinal para el diseño y síntesis química de nuevas moléculas con actividad anticancerígena.

Cynthia Fernández Pomares es investigadora del programa Estancias Posdoctorales por México 2021 del Consejo Nacional de Ciencia y Tecnología (Conacyt). Estudia el efecto de compuestos anticancerígenos sobre el metabolismo.