



DISEÑO DE FÁRMACOS MEDIANTE EL ESTUDIO *IN SILICO* DE ACOPLAMIENTO MOLECULAR (DOCKING) Y EVALUACIÓN ANTICANCERÍGENA *IN VITRO* DE LOS COMPLEJOS DE RUTENIO(II)-FENANTROLINA

Cristian A. Tapiero González,¹ L. Diana Castañeda Trujillo,¹ J.A. Güida¹

¹CEQUINOR, (UNLP-CONICET CCT La Plata), Boulevard 120 N° 1465, La Plata.

Correo electrónico de contacto: ldcastaneda@uniquindio.edu.co

Los metalofármacos de platino han sido los pilares de la terapia oncológica desde la introducción del cisplatino en 1978;^[1] sin embargo, la búsqueda de alternativas con mayor selectividad y menor toxicidad ha impulsado el diseño de nuevos complejos de coordinación y organometálicos, destacando los sistemas de rutenio(II)-fenantrolina coordinados con derivados pirazólicos, azocompuestos y curcuminoides. La caracterización estructural por espectroscopia infrarroja (FTIR) de estos nuevos agentes permite confirmar la exitosa coordinación del metal mediante bandas características muy definidas, tales como la vibración de tensión del enlace C=N del anillo de fenantrolina y los grupos pirazólicos que se desplazan típicamente hacia la región de **1615–1630 cm⁻¹**, así como las señales asociadas a los grupos carbonilo ν C=O de los curcuminoides coordinados alrededor de **1625 cm⁻¹** y las bandas de baja frecuencia correspondientes a los estiramientos del enlace Ru-N en el rango de **510–540 cm⁻¹**.^[2]

Como parte de una estrategia de medicina traslacional eficiente y con conciencia de recursos, este proyecto integra la evaluación *in silico* mediante acoplamiento molecular (*Docking*) antes de proceder a la síntesis en laboratorio, asegurando que solo se preparen aquellos compuestos con las interacciones más favorables frente a proteínas clave en cáncer de mama y cérvix. Una vez sintetizados los complejos seleccionados, los espectros infrarrojos experimentales sirven como herramienta fundamental de control de calidad para verificar la pureza y los cambios estructurales clave —como la atenuación o corrimiento de las bandas de los ligandos libres al enlazarse al centro metálico—, garantizando así la reproducibilidad fisicoquímica antes de avanzar hacia las pruebas biológicas *in vitro*.^[3]

REFERENCIAS

1. Chen, H.; Parkinson, J. A.; Gould, R. O.; Parsons, S.; Sadler, P. J. *J. Am. Chem. Soc.* **2002**, 124 (12), 3064–3082.
2. Nongpiur, C. G. L.; Kharmawlong, V.; Rani, A.; Nongbri, K.; Syiemlieh, S. M.; Myrboh, B.; KMA, P.; Wankhar, K.; Myrboh, K.; Roy, M. K. *J. Inorg. Biochem.* **2023**, 238, 112045.
3. Jaouen, G.; Dyson, P. J. En *Comprehensive Organometallic Chemistry III*; Mingos, D. M. P., Crabtree, R. H., Eds.; Elsevier Ltd: Oxford, UK, **2007**.