



I Jornada Territorial de Socialización de Experiencias en Calidad. CALISANT 2025  
 "IX Jornada Territorial. "TOXI-CUBA 2026"  
 Santiago de Cuba. 3 de Marzo al 24 de abril del 2026



## Evaluación *in silico* del potencial neuroprotector de *Cymbopogon citratus* (caña santa)

**Autor(es):** Dr.C. Onel Fong Lores<sup>1</sup>, Dr.C. Clara Azalea Berenguer Rivas<sup>2</sup>, Dr.C. Humberto Joaquín Morris Quevedo<sup>3</sup>, MSc. Sandra Hechavarría Lafargue<sup>4</sup>, Lic. Yilien Fernández Urdaneta<sup>5</sup>

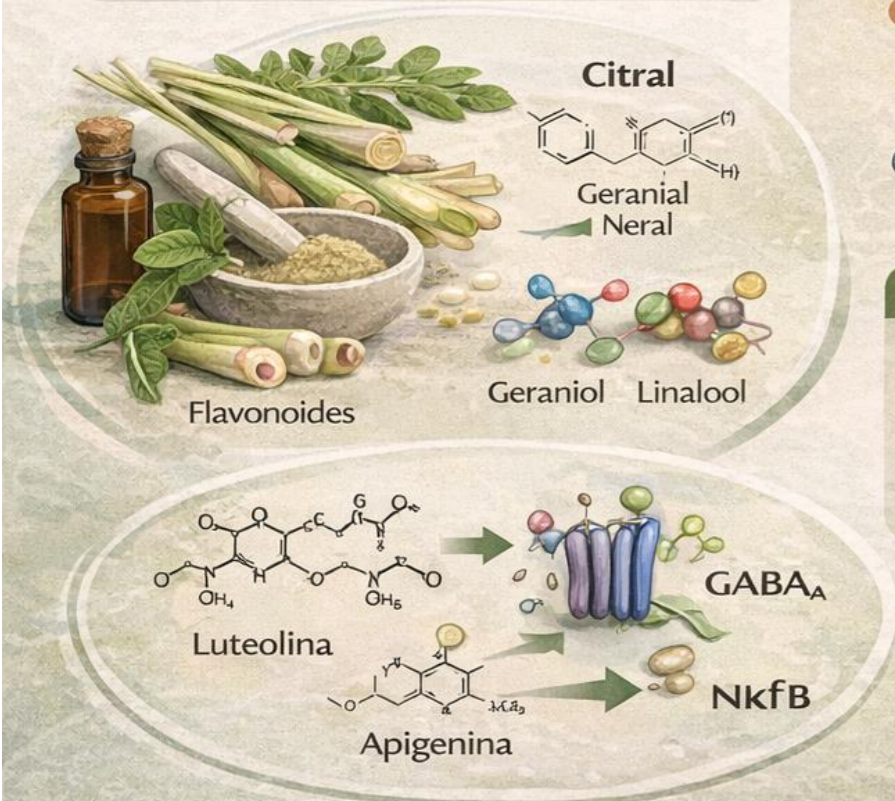
- 1 Centro de Toxicología y Biomedicina, Universidad Ciencias Médicas, Cuba, onelfong@infomed.sld.cu, <https://orcid.org/0000-0001-8595-3107>  
 2 Departamento de Farmacia, Universidad de Oriente, Cuba, clarabr@uo.edu.cu, <https://orcid.org/0000-0002-1259-3910>  
 3 Departamento de Farmacia, Universidad de Oriente, Cuba, jquevedo@uo.edu.cu, <https://orcid.org/0000-0002-3916-8594>  
 4 Laboratorio Farmacéutico Oriente, Cuba, sandra@lfo.biocubafarma.cu, <https://orcid.org/0009-0006-1993-442X>  
 5 Laboratorio Farmacéutico Oriente, Cuba, <https://orcid.org/0000-0003-2075-4750>

### INTRODUCCION (OBJETIVOS)

#### Evaluación *In Silico* del Potencial Neuroprotector de *Cymbopogon citratus* (Caña Santa)

##### INTRODUCCIÓN

La *Cymbopogon citratus* (caña santa) es una planta de interés medicinal conocida por sus aceites esenciales ricos en monoterpenos antioxidantes y flavonoides.



##### Estrés Oxidativo & Neuroinflamación



##### OBJETIVOS DEL ESTUDIO

- ✓ Evaluar el potencial neuroprotector (NP) de compuestos fitoterapéuticos seleccionados de la planta *Cymbopogon citratus*.
- 🎯 Proponer dianas moleculares y afinar estrategias de descubrimiento de fármacos dirigidos a reducir el estrés oxidativo e inflamatorio neural.

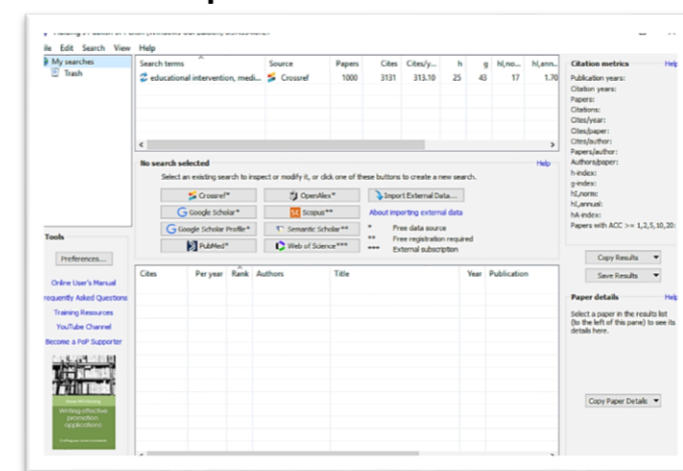
##### ESTUDIO IN SILICO

##### DIANAS MOLECULARES



### METODOLOGIA

Selección de los principales compuestos bioactivos de las partes aéreas de la planta *C. citratus* para los estudios *in silico*



#### Estudios *in silico*

Obtención de SMILES (sistema de introducción lineal molecular simplificada) → PubChem

Evaluación de absorción, distribución, metabolismo y excreción (ADME)



Predicción de interacción con dianas moleculares



Predicción de Toxicidad



### RESULTADOS Y DISCUSION

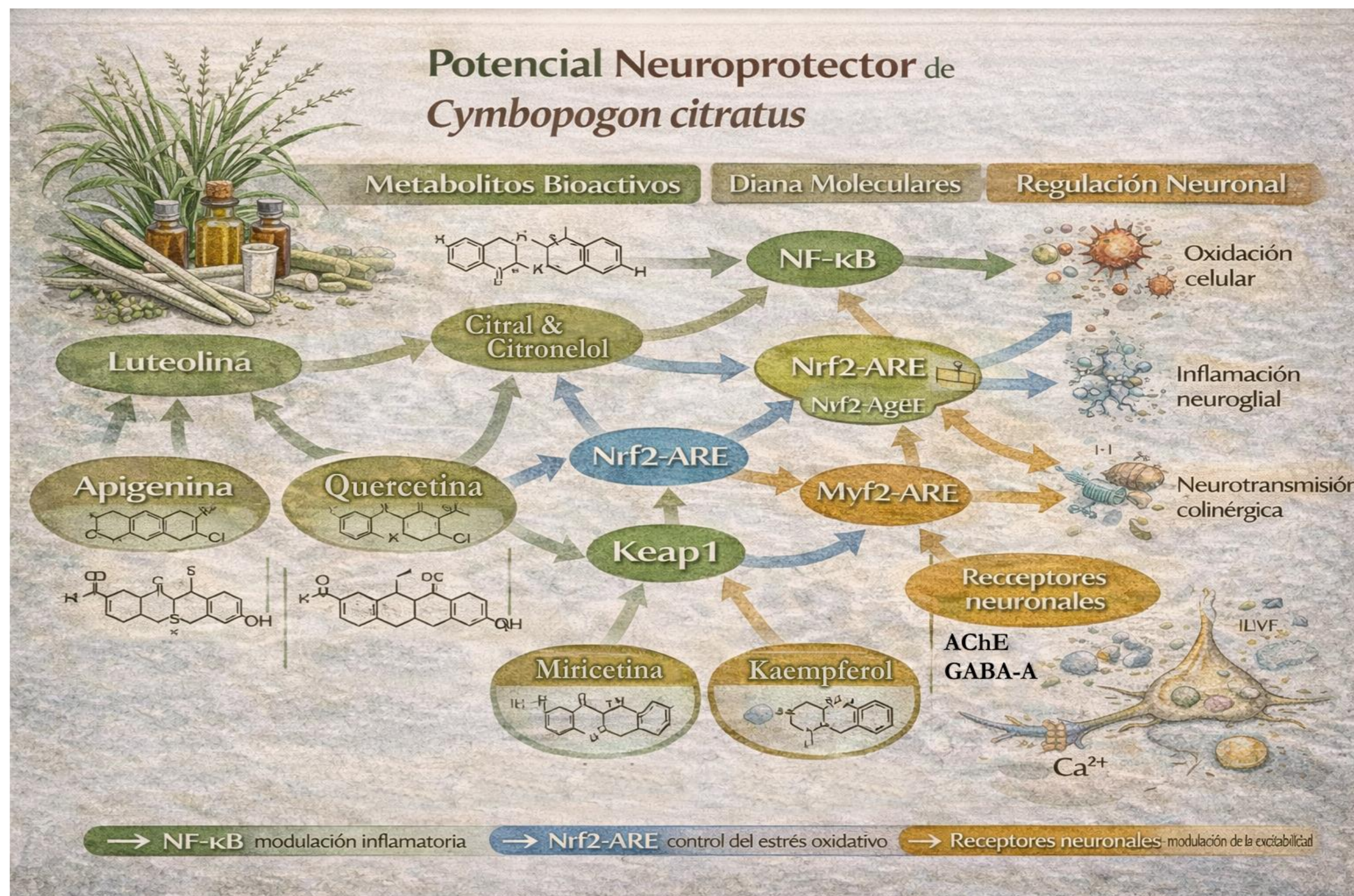
Principales compuestos bioactivos de las partes aéreas de la planta *C. citratus*, seleccionados para los estudios *in silico*:

1. Citronelol (alcohol monoterpenico)
2. Citral (aldehído monoterpenico)
3. Apigenina (flavonoide)
4. Luteolina (flavonoide)
5. Quercetina (flavonoide)
6. Miricetina (flavonoide)
7. Kaempferol (flavonoide)

##### Perfil funcional

Propiedad	<i>Cymbopogon citratus</i>
Antioxidante	Muy Alta
Antiinflamatoria	Alta
Procognitiva	Moderada
Ansiolítica/sedante	Alta
Neuroprotección mitocondrial	Moderada
Acción rápida SNC	Alta
Perfil multidiana	Moderada-Alta

Diana molecular	<i>Cymbopogon citratus</i>
Nrf2 / Keap1	★★★★
NF-κB	★★★★
AChE	★★★★
GABA <sub>A</sub>	★★★★★
PI3K / Akt / BDNF	★★★
NMDA / Ca <sup>2+</sup>	★★★★
iNOS / NOX	★★★★★



### CONCLUSIONES

Los metabolitos de *Cymbopogon citratus* han mostrado tener una acción rápida y neuromoduladora (GABA<sub>A</sub>, NMDA), presentando un perfil de Neuroprotección más funcional/preventiva que estructural. Por estas razones, se sugiere que esta planta se emplee de manera ideal para el tratamiento de la ansiedad, el estrés, el insomnio y la neuroprotección leve.

