



Predicción *in silico* de la actividad inmunomoduladora de los compuestos bioactivos de *Petiveria alliacea* (anamú)

Autor(es): Dr.C. Onel Fong Lores¹, Dr.C. Clara Azalea Berenguer Rivas², Dr.C. Humberto Joaquín Morris Quevedo³, MSc. Sandra Hechavarría Lafargue⁴, Lic. Anisleidys Labrada Hechavarría⁵

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/0000-0001-8597-9112>

INTRODUCCION (OBJETIVOS)

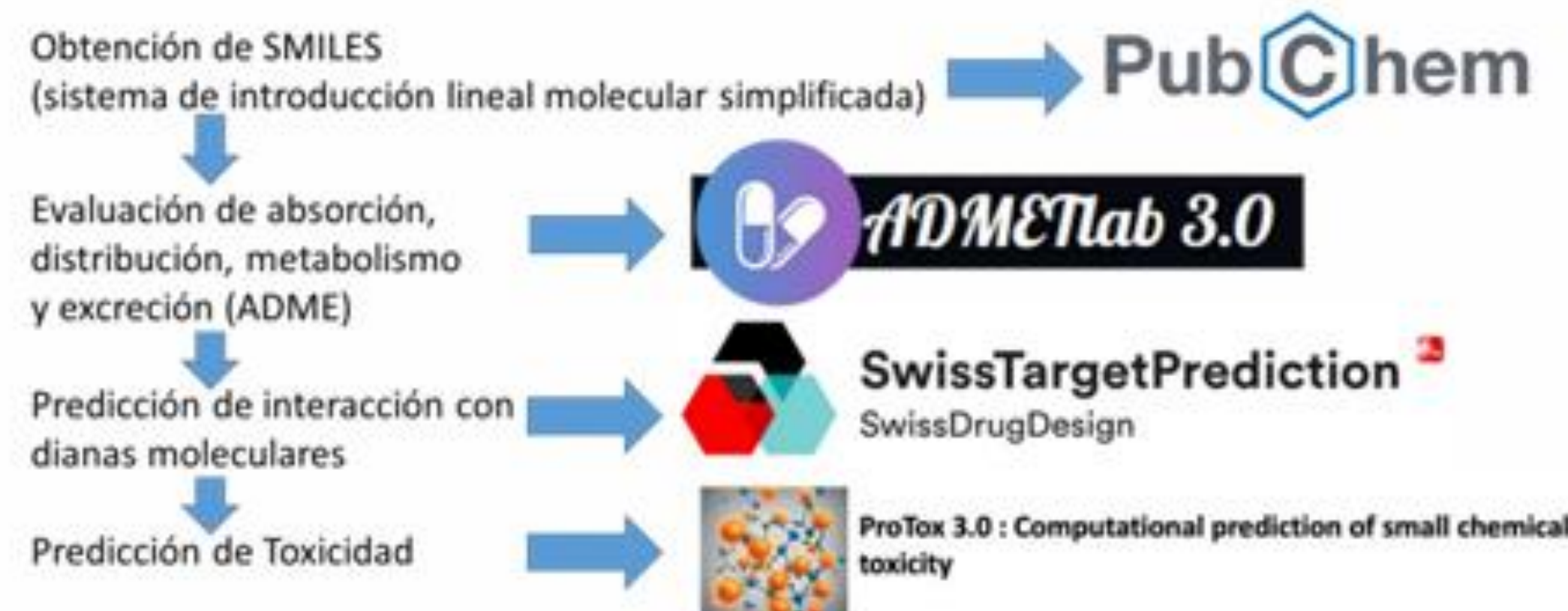


METODOLOGIA

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



Estudios *in silico*

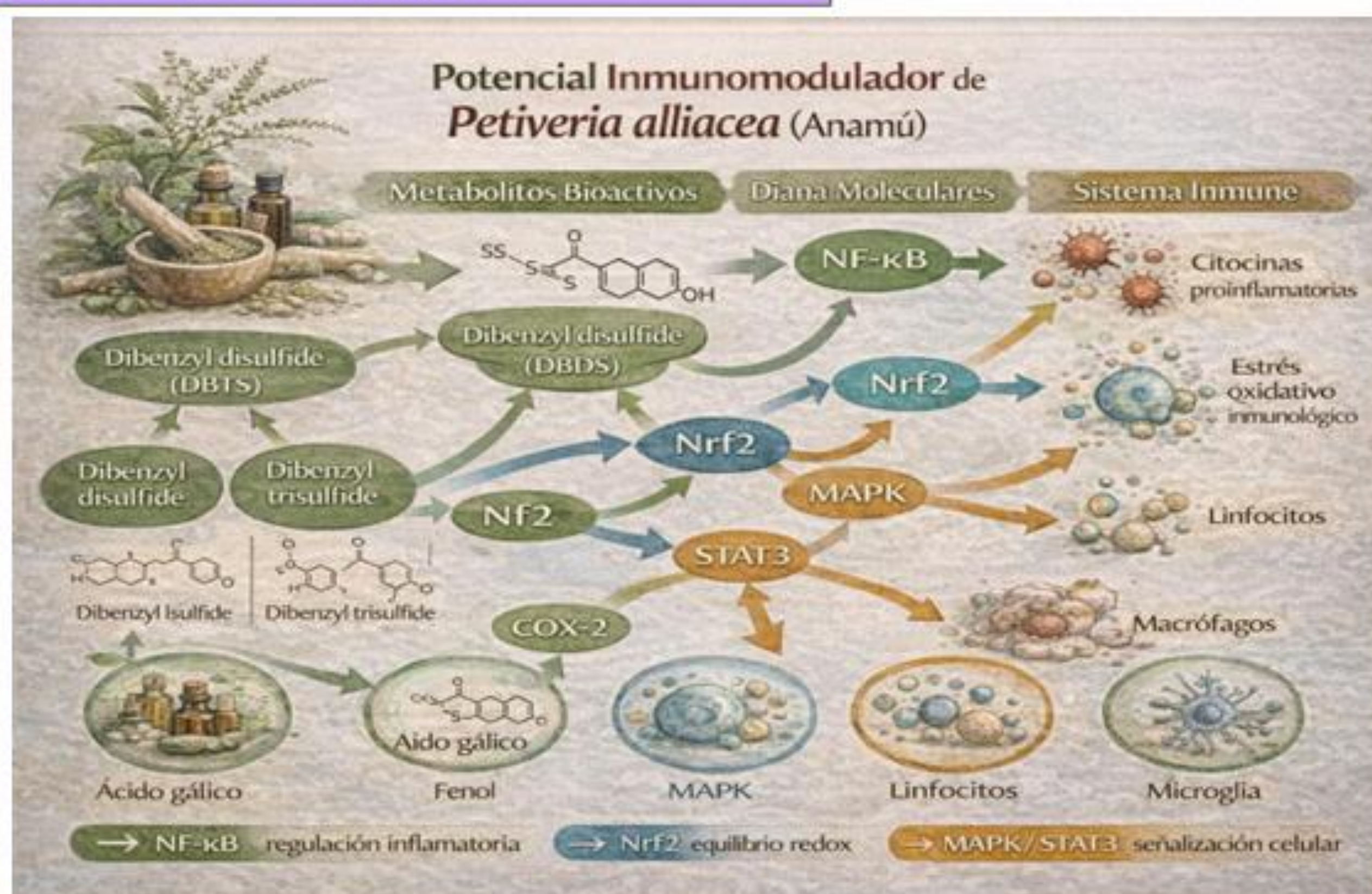


RESULTADOS Y DISCUSION

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

1. Dibenil disulfuro DBDS (compuesto azufrado)
2. Isoarborinol (terpeno)
3. Narcissina (flavonoide)
4. Isorhamnetina (flavonoide)
5. Quercetina (flavonoide)
6. Ácido ferúlico (ácido fenólico)
7. Ácido gálico (ácido fenólico)
8. Ácido cafeico (ácido fenólico)

Metabolito	Diana molecular
DBDS	NF-kB
Narcissina	Nrf2
Isorhamnetina	STAT3
Quercetina	TLR4 / NF-kB
Ácido gálico	Nrf2
Ácido cafeico	MAPK



CONCLUSIONES

Los resultados *in silico* sugieren que los metabolitos de *Petiveria alliacea* presentan un potencial perfil inmunomodulador multidiana. Los análisis predijeron interacciones potenciales entre varios metabolitos de la planta y proteínas clave asociadas con la regulación del sistema inmunológico. Estos hallazgos respaldan el interés farmacológico de la especie y proporcionan una base teórica para futuros estudios experimentales orientados al desarrollo de posibles fitomedicamentos con actividad inmunorreguladora.

