

Estudio in silico de los metabolitos principales de *Bacopa procumbens* como agentes potenciales del crecimiento capilar

Salvador Pérez Mora¹, María del Consuelo Gómez García¹, David Guillermo Pérez Ishiwara¹.

¹Laboratorio de Biomedicina Molecular I, Escuela Nacional de Medicina y Homeopatía, Instituto Politécnico Nacional, ciudad de México, CP 07320, México

Responsable: chava_1025@hotmail.com

Palabras clave: Bacopa procumbens, metabolitos, crecimiento capilar.

Introducción. El crecimiento del pelo consta de cuatro fases: crecimiento (anágena), regresión (catágena), reposo (telógena) y desprendimiento (exógena) (1). Su alteración puede causar alopecia (2). La alopecia afecta alrededor del 50% de los hombres y el 30% de las mujeres a nivel mundial. Actualmente, el Minoxidil y la finasterida son los únicos tratamientos aprobados por la FDA para esta patología, sin embargo, presentan efectos secundarios adversos (3). Por este motivo, nuestro objetivo fue predecir las posibles actividades de los metabolitos mayoritarios de *Bacopa procumbens* (*B. procumbens*) y evaluar su posible modulación en vías moleculares importantes para el crecimiento del pelo.

Metodología. Se obtuvo un código SMILE en la plataforma PubChem para los 14 metabolitos mayoritarios previamente reportados por nuestro equipo de trabajo en *B. procumbens*. Utilizando este código, se predijeron las posibles actividades o blancos moleculares de estos compuestos en la plataforma en el servidor Pass online. Con base a esto, se llevaron a cabo acoplamiento molecular ciegos mediante el uso de AutoDock. Las proteínas en 3D fueron obtenidas en la plataforma Protein Data Bank o modeladas por SWISS-MODEL – ExPasy. Los mejores acoplamiento fueron sometidos a los programas Maestro de Schrödinger y MOE para un análisis intermolecular (Fig. 1).

Resultados.

Se determinó que algunos de los metabolitos mayoritarios de *B. procumbens* tienen el potencial de ejercer funciones importantes en la promoción del crecimiento del cabello a través de su capacidad antioxidante y moduladora de la vía androgénica y apoptótica, las cuales son fundamentales para la homeostasis del ciclo capilar. Al realizar acoplamiento molecular, se identificaron varios metabolitos que podrían estar regulando la actividad de la enzima 5-alfa reductasa y el receptor androgénico en la vía androgénica. Otros metabolitos podrían estar actuando como moduladores de la proteína Keap1, permitiendo la liberación de NRF2 para regular la transcripción de genes relacionados con el sistema antioxidante.

Además, se encontró que otros metabolitos podrían ejercer funciones reguladoras de la caspasa 3 y 9 en las vías apoptóticas. Algunos de los metabolitos principales que se identificaron como posibles moduladores de estas vías incluyen apigenina, eucol, acantósido B, stevenina, paeoniflorina, naringenina, koparina y Z-astringina.

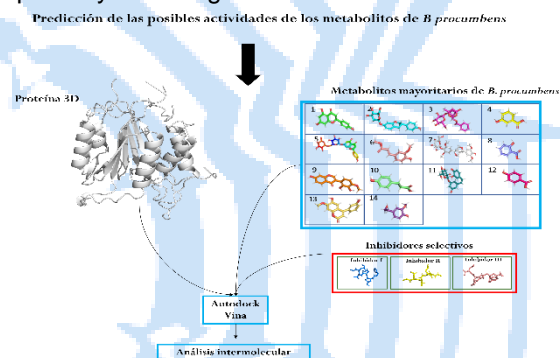


Figura. 1. Metodología general.

Conclusión. Los metabolitos de *Bacopa procumbens* podrían actuar como promotores del crecimiento del pelo al regular vías moleculares esenciales. Estos resultados ofrecen una alternativa potencial a los tratamientos actuales de la alopecia que pueden tener efectos secundarios adversos. La identificación de metabolitos específicos abre la puerta a futuros estudios y terapias naturales para la alopecia.

Agradecimiento. Al CONACYT por su valioso apoyo con la beca de posgrado otorgada. Asimismo, al IPN por su apoyo económico en la convocatoria de proyectos de desarrollo tecnológico e innovación. Ambos apoyos fueron fundamentales para lograr el éxito de este proyecto.

Referencias

1. Park, A. M., Khan, S., & Rawnsley, J. (2018). Hair Biology: Growth and Pigmentation. In Facial Plastic Surgery Clinics of North America (Vol. 26, Issue 4). <https://doi.org/10.1016/j.fsc.2018.06.003>
2. Piérard-Franchimont, C., & Piérard, G. E. (2013). Alterations in hair follicle dynamics in women. In BioMed Research International (Vol. 2013). <https://doi.org/10.1155/2013/957432>
3. Ateeq, S. S. (2015). A New Topical Formulation of Minoxidil and Finasteride Improves Hair Growth in Men with Androgenetic Alopecia. Journal of Clinical & Experimental Dermatology Research, 06(01). <https://doi.org/10.4172/2155-9554.1000253>