



"El saber de mis hijos  
hará mi grandeza"



UNIVERSIDAD DE SONORA

DEPARTAMENTO DE INVESTIGACIONES CIENTÍFICAS Y TECNOLÓGICAS  
POSGRADO EN BIOCIENCIAS

---

**Síntesis y Evaluación de la Actividad Antibacteriana y Antiproliferativa de  
Compuestos Conjugados Derivados de Aminopiridina y Ácidos Carboxílicos  
y su Relación Estructura-Actividad**

Presenta: MC Ana Laura Villa Reyna

Director: Dr. Martín Pérez Velázquez

Co-Directora: Dra. Milagros Aguilar Martínez

Resumen

Actualmente existe una gran variedad de fármacos obtenidos a partir de compuestos químicos que presentan propiedades farmacológicas, sin embargo, una problemática que va en aumento en torno a ellos es la resistencia bacteriana, la baja efectividad y una variedad de efectos secundarios nocivos en quien los consume. Los compuestos conjugados derivados de aminopiridinas y ácidos carboxílicos han demostrado ser una alternativa con potencial antibacteriano y antiproliferativo; siendo el grupo amida, la región aminoaromática y la lipofiliidad de los compuestos conjugados los responsables de la relación estructura-actividad. Por esta razón se propone evaluar la relación estructura-actividad cuantitativa *in silico* de compuestos conjugados derivados de la *ortho*, *meta* y *para*-aminopiridina y los ácidos geránico, sórbico, benzoico y nicotínico así como sus propiedades farmacocinéticas. Posteriormente se llevará a cabo la síntesis y caracterización de los compuestos conjugados que hayan presentado los mejores resultados y, por último, se realizará la evaluación de las actividades antibacteriana y antiproliferativa *in vitro* de los compuestos seleccionados. Nos encontramos trabajando en la obtención del modelo matemático para la predicción de la actividad antibacteriana *in silico*, así como en la síntesis y caracterización de los compuestos 1a y 3a los cuales presentaron los mejores resultados en la actividad antiproliferativa.

Abstract

Currently, there is a great variety of drugs obtained from chemical compounds that show pharmacological properties. However, bacterial resistance, low effectiveness, and a range of harmful side effects are rising issues among consumers. Conjugated compounds derived from aminopyridines and carboxylic acids have shown to be an alternative with antibacterial and antiproliferative potential. The amide group, the amino aromatic region, and the lipophilicity of these conjugated compounds are responsible for their structure-activity relationship. Therefore, we propose an *in silico* quantitative structure-activity relationship evaluation of conjugated compounds derived from *ortho*-, *meta*-, and *para*-aminopyridine and geranic, sorbic, benzoic, and nicotinic acids, as well as their pharmacokinetic properties. Subsequently, we will synthesize and characterize the conjugated compounds showing the best results. Finally, *in vitro* antibacterial and antiproliferative activities will be assessed. We are currently working on obtaining the mathematical model for the *in silico* prediction of antibacterial activity, as well as the synthesis and characterization of compounds 1a and 3a, which show the best results in antiproliferative activity.