**DISEÑO, SÍNTESIS, CRIBADO MOLECULAR Y EVALUACION DE COMPUESTOS DERIVADOS DE LOS ÁCIDO CUMÁRICO CON ACTIVIDAD ANTITUBERCULOSIS**

España, Pierine ,1; Insuasty, Daniel, 2; Márquez, Edgar, 3

1  Ciencias Naturales. Grupo de Investigación en Biología y Química. Universidad del Norte. Colombia. [Pespana@uninorte.edu.co](mailto:Pespana@uninorte.edu.co) .

2 Ciencias Naturales. Grupo de Investigación en Biología y Química. Universidad del Norte. Colombia. [insuastyd@uninorte.edu.co](mailto:insuastyd@uninorte.edu.co)

3Ciencias Naturales. Grupo de Investigación en Biología y Química. Universidad del Norte. Colombia. [ebrazon@uninorte.edu.co](mailto:ebrazon@uninorte.edu.co)

**Palabras clave:** ácidos cumárico, ésteres, *M. tuberculosis,* QSAR, docking molecular, inh A.

**Resumen:** *M. tuberculosis* es una bacteria que causa tuberculosis (TB). Se estima que alrededor de un 33% de la población mundial, está infectada con la bacteria en fase durmiente. El tratamiento actual debido a su larga duración (mínimo seis meses) muchos pacientes lo abandonan, lo que lleva a la aparición de cepas resistentes (CR). Aunque existen investigaciones que apuntan al desarrollo de nuevos medicamentos anti-TB, no es claro si hay suficiente investigación en fase de descubrimiento para asegurar principios activos que enfrenten eficazmente la bacteria (incluyendo CR), acortando el tiempo de administración y mejorando la adherencia*.* Este trabajo tuvo como propósito la generación de derivados tipo éster de los tres isómeros del ácido cumárico, que aumenten la potencia de inhibición contra el crecimiento de *M. tuberculosis*. Todos los compuestos se diseñaron mediante técnicas computaciones, a través de los programas GAUSSIAN 09W y CHEMBIOOFFICE 2012, usando el método DFT, con el conjunto de base 6-31++G(d,p). Los ésteres alifáticos se obtuvieron a partir de esterificación de Fischer. También, se realizaron reacciones one-pot, mediadas por SOCl2 para la obtención de ésteres aromáticos se purificaron por cromatografía de columna y se caracterizarán RMN-1H, 13C y espectrometría de masas. Se realizó el docking con cada compuesto frente a la enzima INHA. la bioactividad de cada compuesto se evaluó mediante el ensayo SPOTi frente a la cepa *M. tuberculosis* H37Rv y *M. bovis* BCG. El compuesto más activo fue el éster cinamato de butilo cuya MIC fue 20 mg/mL.