Título: EVALUACIÓN *IN SILICO* DE LA ACTIVIDAD ANTITUMORAL DE POLIFENOLES DE LA SETA MEDICINAL PLEUROTUS OSTREATUS

Autores: Lisandra Mirian Cutiño Viñals, Javier Peña López, Rosa Isabel Aguirre Alcolea, Humberto Morris Quevedo.

En la actualidad reviste importancia explorar con un enfoque predictivo las propiedades antitumorales de biomoléculas antioxidantes presentes en la seta medicinal *Pleurotus ostreatus*, como evidencias adicionales para el desarrollo de formulaciones nutraceúticas y terapéuticas de origen natural, que puedan ser empleadas para la prevención y el tratamiento del cáncer. El presente trabajo tuvo como objetivo evaluar el potencial antitumoral de antioxidantes presentes en *Pleurotus ostreatus* mediante el análisis in silico de su similitud estructural con antitumorales de referencia de la Anti- Cancer Agent Mechanism Database, del Instituto Nacional del Cáncer (NCI). Se identificaron 24 compuestos similares estructuralmente a los cuatro polifenoles de *Pleurotus ostreatus* considerados en el estudio, con el empleo del programa PowerMV 0.61; correspondiendo el mayor número al ácido protocatecuico y a la miricetina. A partir del análisis del perfil de actividad se sugiere como probables mecanismos de acción su actuación como antimitóticos, antimetabolitos de DNA y agentes alquilantes. Las diferentes líneas tumorales mostraron una amplia variabilidad en cuanto a la sensibilidad individual ante los compuestos estructuralmente similares a los fenoles estudiados de *Pleurotus ostreatus.* Se identificaron siete compuestos de elevada actividad frente a las líneas celulares tumorales de pulmón y colon destacándose en particular los cuatro compuestos de alta analogía estructural con la naringina. Las herramientas bioinformáticas fueron útiles para la predicción in silico de la actividad antitumoral de biomoléculas fenólicas de *Pleurotus ostreatus*.