

Integración del docking molecular y los sistemas avanzados de liberación de fármacos en la farmacología clínica moderna

Integration of molecular docking and advanced drug delivery systems in modern clinical pharmacology

Génesis Michelle Cartagena Martínez

ORCID: 0000-0003-2190-9419

Universidad Central del Ecuador

Cynthia Lissette Olvera Romero

ORCID: 0009-0008-0162-0507

Hospital General Manta – IESS, Ecuador

José Julián Layana Rodríguez

ORCID: 0009-0002-7054-2756

Hospital General Manta – IESS, Ecuador

David Alejandro Delgado Jervis

ORCID: 0009-0004-1212-3769

Hospital de Especialidades Dr. Abel Gilbert Pontón, Ecuador

María Fernanda Ortiz Andrade

ORCID: 0009-0005-5826-8530

Corporación Monte Sinaí – SINAILAB, Ecuador

Ángeles Ariana Ortiz Andrade

ORCID: 0009-0003-1602-8307

Universidad de las Américas, Ecuador

Eduardo Fabián Reina Santos

ORCID: 0009-0009-7666-531X

Investigador independiente, Ecuador

María Paula Enríquez Vinueza

ORCID: 0009-0001-6914-792X

Universidad Central del Ecuador

RESUMEN

El avance en la farmacología clínica moderna ha sido impulsado por la integración de tecnologías innovadoras como el docking molecular y los sistemas avanzados de liberación de fármacos. El docking molecular permite predecir con precisión las interacciones entre moléculas pequeñas y sus blancos terapéuticos, optimizando así el diseño de medicamentos más específicos y eficaces. Por otro lado, los sistemas avanzados de liberación de fármacos, como los nanotransportadores y las formulaciones controladas, han revolucionado la administración terapéutica al mejorar la biodisponibilidad, reducir los efectos secundarios y permitir una liberación dirigida en tejidos específicos. La combinación de estas herramientas no solo acelera el desarrollo de nuevos tratamientos, sino que también abre posibilidades para la personalización de la terapia en función de las características moleculares del paciente. Esta revisión narrativa explora cómo la sinergia entre estas tecnologías está transformando el paradigma del tratamiento de enfermedades complejas, destacando su impacto en la eficacia clínica y la seguridad de los pacientes. Además, se abordan los desafíos actuales y futuros en su implementación, así como las perspectivas para integrar estas estrategias con otras disciplinas emergentes, como la inteligencia artificial y la medicina de precisión, en beneficio de la práctica clínica contemporánea.

Palabras clave: Docking molecular, Sistemas avanzados, Liberación de fármacos, Farmacología clínica, Integración, Innovación.

ABSTRACT

Advancement in modern clinical pharmacology has been driven by the integration of innovative technologies such as molecular docking and advanced drug delivery systems. Molecular docking makes it possible to accurately predict the interactions between small molecules and their therapeutic targets, thus optimizing the design of more specific and effective medications. On the other hand, advanced drug delivery systems, such as nanocarriers and controlled formulations, have revolutionized therapeutic delivery by improving bioavailability, reducing side effects, and enabling targeted release in specific tissues. The combination of these tools not only accelerates the development of new treatments, but also opens possibilities for personalization of therapy based on the patient's molecular characteristics. This narrative review explores how the synergy between these technologies is transforming the treatment paradigm for complex diseases, highlighting their impact on clinical efficacy and patient safety. In addition, current and future challenges in their implementation are addressed, as well as perspectives for integrating these strategies with other emerging disciplines, such as artificial intelligence and precision medicine, for the benefit of contemporary clinical practice.

Keywords: Molecular docking, Advanced systems, Drug release, Clinical pharmacology, Integration, Innovation.

INTRODUCCIÓN

La integración del docking molecular y los sistemas avanzados de liberación de fármacos representa un avance significativo en la farmacología clínica moderna, ofreciendo nuevas perspectivas para el desarrollo de terapias más eficaces y personalizadas. El docking molecular, como herramienta computacional, permite predecir y analizar las interacciones entre fármacos y sus dianas biológicas, optimizando el diseño de moléculas con alta afinidad y especificidad (1). Por otro lado, los sistemas avanzados de liberación de fármacos, como nanopartículas, liposomas y polímeros inteligentes, proporcionan estrategias innovadoras para mejorar la biodisponibilidad, reducir efectos secundarios y alcanzar una liberación controlada en tejidos específicos. La combinación de estas tecnologías no solo acelera el proceso de descubrimiento y desarrollo de nuevos medicamentos, sino que también aborda desafíos críticos en el tratamiento de enfermedades complejas (2). Este enfoque interdisciplinario permite una transición hacia una medicina más precisa y eficiente, donde la sinergia entre la modelización molecular y las plataformas avanzadas de administración farmacológica redefine los estándares terapéuticos (1,2). En esta revisión, se explorarán los avances recientes en ambas áreas, destacando su impacto en la práctica clínica y su potencial para transformar el panorama de la farmacología contemporánea.

METODOLOGÍA

Para la elaboración de este artículo de revisión narrativa, se realizó una búsqueda exhaustiva en bases de datos científicas como PubMed, Scopus y Web of Science. Se emplearon términos controlados MeSH y DeCS como "molecular docking", "drug delivery systems", "clinical pharmacology" y "drug design", combinados mediante operadores booleanos (AND, OR, NOT) para refinar los resultados. Los criterios de inclusión consideraron artículos publicados en los últimos 10 años en inglés y español, con acceso completo al texto y que abordaran la integración del docking molecular y los sistemas avanzados de liberación de fármacos en el ámbito clínico. Se excluyeron estudios duplicados, artículos no relacionados directamente con el tema y aquellos con información incompleta o de baja calidad metodológica. En total, se revisaron 85 artículos, de los cuales 16 cumplieron con los criterios establecidos y fueron seleccionados para su análisis en profundidad. Estos estudios permitieron identificar avances recientes, aplicaciones clínicas y perspectivas futuras sobre la sinergia entre el diseño molecular computacional y las tecnologías avanzadas de liberación de medicamentos en la farmacología clínica moderna.

RESULTADOS Y DISCUSIÓN

La Introducción al docking molecular: principios y aplicaciones

El docking molecular es una herramienta computacional clave en la investigación farmacológica moderna, utilizada para predecir la interacción entre moléculas pequeñas (ligandos) y sus dianas biológicas (generalmente proteínas). Este enfoque se basa en principios fundamentales de química teórica y estructural, permitiendo modelar y evaluar el acoplamiento entre un ligando y un sitio activo específico de una macromolécula. Su objetivo principal es identificar compuestos con alta afinidad y especificidad hacia una diana terapéutica, contribuyendo significativamente al diseño racional de fármacos (1).

El proceso de docking molecular implica dos etapas principales: la generación de conformaciones del ligando y la evaluación de estas conformaciones en el sitio activo de la proteína. Los algoritmos utilizados en este método exploran el espacio conformacional del ligando para identificar su orientación y posición óptimas dentro del sitio de unión. Posteriormente, se aplica una función de puntuación que estima la energía de interacción entre el ligando y la proteína, proporcionando así un indicador cuantitativo de la afinidad del complejo formado. Estas funciones consideran factores como interacciones electrostáticas, fuerzas de Van der Waals y la solvatación (1).

Entre las aplicaciones más destacadas del docking molecular se encuentra el descubrimiento de nuevos fármacos, especialmente en etapas iniciales como el cribado virtual. Este enfoque permite evaluar grandes bibliotecas de compuestos químicos en busca de candidatos prometedores, reduciendo significativamente los costos y el tiempo asociados al desarrollo farmacéutico. Además, el docking molecular se utiliza para estudiar mecanismos moleculares de acción, identificar posibles efectos secundarios mediante el análisis de interacciones no deseadas y optimizar estructuras químicas para mejorar sus propiedades farmacológicas (1,2).

En el contexto de la farmacología clínica moderna, el docking molecular también se integra con tecnologías avanzadas como la inteligencia artificial y los sistemas avanzados de liberación de fármacos. Por ejemplo, los modelos

computacionales derivados del docking pueden ser usados para diseñar nanopartículas funcionalizadas que transporten medicamentos directamente a tejidos específicos, mejorando la eficacia terapéutica y reduciendo efectos adversos. Asimismo, el análisis de interacciones ligando-proteína puede guiar el desarrollo de terapias dirigidas en enfermedades complejas como el cáncer o las patologías neurodegenerativas (2).

No obstante, es importante reconocer las limitaciones inherentes a esta técnica. La precisión del docking molecular depende en gran medida de la calidad de las estructuras proteicas disponibles y de las aproximaciones empleadas en las funciones de puntuación. Además, factores dinámicos como la flexibilidad conformacional de las proteínas y los efectos del entorno biológico no siempre son representados adecuadamente. Por ello, se recomienda complementar este enfoque con simulaciones más avanzadas, como dinámica molecular, para obtener resultados más robustos (2).

Métodos computacionales en el docking molecular

El docking molecular es una herramienta computacional clave en la investigación farmacológica moderna, especialmente en el diseño y desarrollo de fármacos. Este método permite predecir y analizar la interacción entre moléculas pequeñas (ligandos) y macromoléculas biológicas (receptores), como proteínas o ácidos nucleicos, proporcionando información esencial sobre la afinidad de unión y la orientación óptima del ligando en el sitio activo del receptor. En este contexto, los métodos computacionales han evolucionado significativamente, mejorando tanto la precisión como la eficiencia de las simulaciones (3).

Entre las técnicas más utilizadas en el docking molecular se encuentran los métodos de búsqueda y scoring. Los algoritmos de búsqueda exploran el espacio conformacional del ligando dentro del sitio de unión del receptor, mientras que las funciones de scoring evalúan cuantitativamente la energía de interacción entre ambas moléculas. Ejemplos de programas ampliamente utilizados incluyen AutoDock, AutoDock Vina, Glide y GOLD, cada uno con características específicas que los hacen adecuados para diferentes tipos de sistemas moleculares (3).

Un aspecto crucial en el docking molecular es la preparación adecuada de las estructuras moleculares. Esto implica la optimización de las geometrías, la asignación correcta de estados de protonación y la incorporación de parámetros precisos para los campos de fuerza. Además, la flexibilidad del ligando y, en algunos casos, del receptor, puede ser considerada para reflejar mejor las condiciones biológicas reales. La inclusión de agua explícita o iones en la simulación también puede influir significativamente en los resultados, especialmente cuando se trata de interacciones dependientes del entorno (3,4).

En los últimos años, los avances en poder computacional y algoritmos han permitido integrar técnicas más sofisticadas, como el docking flexible y el docking basado en dinámica molecular. Estas metodologías permiten un modelado más realista de sistemas complejos, considerando tanto movimientos conformacionales del receptor como efectos solvatación más precisos. Asimismo, el uso de inteligencia artificial y aprendizaje automático ha comenzado a revolucionar el campo, mejorando la predicción de afinidades y sugiriendo nuevos candidatos a fármacos con base en grandes bases de datos moleculares (4).

La validación experimental sigue siendo un paso crítico para confirmar los resultados obtenidos mediante docking molecular. Sin embargo, esta herramienta computacional ha demostrado ser particularmente útil en las etapas iniciales del descubrimiento de fármacos, permitiendo reducir significativamente los costos y el tiempo asociados con los ensayos tradicionales. Además, su integración con otras disciplinas, como el diseño de sistemas avanzados de liberación de fármacos, abre nuevas oportunidades para optimizar terapias dirigidas y mejorar la eficacia clínica (4).

Sistemas avanzados de liberación de fármacos: conceptos y clasificación

Los sistemas avanzados de liberación de fármacos representan una innovación clave en la farmacología moderna, permitiendo una administración más eficiente, controlada y específica de los medicamentos. Estos sistemas buscan superar las limitaciones de las formulaciones convencionales, como la biodisponibilidad reducida, la toxicidad sistémica y la falta de especificidad en el sitio de acción (5).

En términos generales, un sistema avanzado de liberación de fármacos se define como una tecnología diseñada para transportar un principio activo al organismo de manera controlada, maximizando su eficacia terapéutica y minimizando los efectos adversos. Estos sistemas suelen incorporar materiales biocompatibles y estrategias innovadoras que permiten controlar factores como la velocidad, el lugar y el momento de liberación del fármaco. Además, son capaces de responder a estímulos específicos, como el pH, la temperatura o la presencia de ciertas enzimas, lo que los convierte en herramientas altamente versátiles para tratar diversas patologías (5).

Clasificación de los sistemas avanzados de liberación de fármacos

Estos sistemas pueden clasificarse en función de diferentes criterios, tales como el mecanismo de liberación, el tipo de portador utilizado o su capacidad para responder a estímulos externos (5).

1. Sistemas basados en nanopartículas

Las nanopartículas son estructuras diminutas que actúan como vehículos para transportar fármacos. Dentro de esta categoría se encuentran las nanopartículas poliméricas, liposomas, micelas poliméricas y dendrímeros. Estas tecnologías destacan por su capacidad para mejorar la estabilidad del fármaco, su biodisponibilidad y su acumulación selectiva en tejidos específicos, como tumores (5).

2. Sistemas sensibles a estímulos

Estos sistemas están diseñados para liberar el fármaco en respuesta a estímulos específicos del entorno fisiológico o externos. Entre los estímulos internos se incluyen cambios en el pH (como ocurre en ciertos tumores o en el tracto gastrointestinal) y enzimas específicas. Los estímulos externos pueden incluir luz, ultrasonido o campos magnéticos. Este enfoque permite una liberación precisa y controlada, reduciendo los efectos secundarios (6).

3. Sistemas de liberación controlada

Estos sistemas regulan la velocidad de liberación del fármaco para mantener niveles plasmáticos constantes durante un periodo prolongado. Entre ellos se incluyen los implantes biodegradables, los sistemas osmóticos y las formulaciones de liberación prolongada (6).

4. Sistemas dirigidos

El objetivo principal de estos sistemas es transportar el fármaco directamente al sitio diana, minimizando su interacción con tejidos no deseados. Un ejemplo destacado son los anticuerpos monoclonales conjugados con fármacos, que combinan la especificidad del anticuerpo con la potencia del principio activo (6).

5. Sistemas híbridos

En esta categoría se agrupan tecnologías que combinan diferentes estrategias para maximizar la eficacia terapéutica. Por ejemplo, los liposomas funcionalizados con ligandos específicos pueden dirigirse a células específicas mientras liberan el fármaco en respuesta a estímulos locales (6).

En resumen, los sistemas avanzados de liberación de fármacos han transformado el panorama terapéutico al ofrecer soluciones más personalizadas y efectivas. Su integración con herramientas como el docking molecular abre nuevas posibilidades para el diseño racional de medicamentos y su aplicación clínica. Este enfoque interdisciplinario promete revolucionar la farmacología moderna, optimizando tanto el desarrollo como la administración de terapias innovadoras (6).

Nanotecnología aplicada a la liberación controlada de medicamentos

La nanotecnología ha emergido como una herramienta revolucionaria en el ámbito de la farmacología, permitiendo avances significativos en la liberación controlada de medicamentos. Este enfoque innovador se basa en la manipulación de materiales a escala nanométrica para diseñar sistemas de entrega más precisos, eficaces y seguros. La integración de la nanotecnología en la farmacología clínica moderna ha permitido superar limitaciones asociadas con las terapias convencionales, como la baja biodisponibilidad, la toxicidad sistémica y la falta de especificidad en el sitio de acción (7).

Uno de los principales beneficios de los sistemas de liberación controlada basados en nanotecnología es su capacidad para mejorar la farmacocinética y farmacodinamia de los medicamentos. A través de nanopartículas, liposomas, dendrímeros y nanocápsulas, es posible encapsular fármacos y protegerlos de la degradación prematura, lo que prolonga su vida media en el organismo. Estos sistemas también permiten una liberación sostenida y programada, reduciendo la necesidad de administraciones frecuentes y mejorando la adherencia del paciente al tratamiento (7).

Además, la nanotecnología facilita la liberación dirigida de medicamentos, es decir, su transporte selectivo hacia

tejidos o células específicas. Esto se logra mediante el diseño de nanotransportadores funcionalizados con ligandos que reconocen receptores específicos en las células diana, como en el caso de terapias oncológicas dirigidas. Este enfoque no solo incrementa la eficacia del tratamiento al concentrar el fármaco en el sitio afectado, sino que también minimiza los efectos adversos al reducir la exposición a tejidos sanos (7,8).

En el contexto clínico, los sistemas avanzados de liberación basados en nanotecnología han demostrado ser particularmente útiles en el tratamiento de enfermedades crónicas y complejas, como el cáncer, las enfermedades neurodegenerativas y las infecciones resistentes a antibióticos. Por ejemplo, los liposomas cargados con agentes quimioterapéuticos han mostrado una mayor eficacia terapéutica y menor toxicidad en comparación con las formulaciones tradicionales. Asimismo, los sistemas basados en nanopartículas pueden cruzar barreras biológicas difíciles, como la barrera hematoencefálica, abriendo nuevas posibilidades para el tratamiento de trastornos neurológicos (8).

Sin embargo, a pesar de sus ventajas prometedoras, la aplicación clínica de la nanotecnología enfrenta desafíos importantes. Entre ellos se encuentran la complejidad en la fabricación a gran escala, los elevados costos de producción y la necesidad de estudios exhaustivos sobre su seguridad a largo plazo. Además, se requiere una regulación estricta para garantizar que estos sistemas sean seguros y eficaces antes de su aprobación para uso clínico (8).

Integración del docking molecular y sistemas de liberación de fármacos: sinergias y avances

La integración del docking molecular y los sistemas avanzados de liberación de fármacos representa un campo de investigación interdisciplinario que ha ganado relevancia en la farmacología clínica moderna debido a su potencial para optimizar el diseño y la administración de terapias dirigidas. Estas dos áreas, aunque inicialmente desarrolladas de manera independiente, han demostrado una sinergia prometedora al combinar la precisión del modelado computacional con la innovación en la entrega controlada de medicamentos (9).

El docking molecular, una herramienta computacional que predice la interacción entre moléculas pequeñas (ligandos) y sus posibles dianas biológicas, ha revolucionado el proceso de descubrimiento de fármacos. Este enfoque permite identificar compuestos con alta afinidad hacia proteínas específicas, optimizando así el diseño de moléculas con propiedades farmacológicas deseadas. Sin embargo, el éxito de un fármaco no solo depende de su afinidad por la diana, sino también de su capacidad para alcanzar el sitio de acción en concentraciones terapéuticamente efectivas sin comprometer la seguridad del paciente. Es aquí donde los sistemas avanzados de liberación de fármacos juegan un papel crucial (9).

Los sistemas de liberación controlada, como nanopartículas, liposomas y conjugados poliméricos, ofrecen soluciones innovadoras para superar las limitaciones farmacocinéticas y farmacodinámicas de los compuestos bioactivos. Estos sistemas permiten una liberación sostenida o dirigida del fármaco, mejorando su biodisponibilidad y reduciendo los efectos secundarios. La integración del docking molecular con estos sistemas facilita un enfoque más racional y eficiente para el desarrollo de terapias personalizadas. Por ejemplo, los resultados obtenidos mediante docking pueden guiar la selección de moléculas que no solo interactúan eficazmente con su diana biológica, sino que también presentan propiedades fisicoquímicas compatibles con vehículos específicos de liberación (9,10).

Un área emergente en esta intersección es el diseño de nanoplataformas funcionalizadas con ligandos optimizados mediante docking molecular. Estas plataformas pueden ser dirigidas activamente hacia tejidos específicos, como tumores o sitios inflamatorios, utilizando ligandos que muestran alta afinidad por biomarcadores presentes en dichas áreas. Además, el modelado computacional puede predecir cómo las propiedades estructurales de estas plataformas influyen en su interacción con el entorno biológico, permitiendo ajustes en su diseño para maximizar la eficacia terapéutica (10).

Los avances en inteligencia artificial y aprendizaje automático también están potenciando esta integración. Algoritmos avanzados pueden analizar grandes volúmenes de datos generados por docking molecular y predecir comportamientos complejos en sistemas de liberación de fármacos, acelerando así el proceso de desarrollo preclínico (10).

Aplicaciones clínicas del docking molecular en farmacología moderna

Las aplicaciones clínicas del docking molecular han revolucionado la farmacología moderna al facilitar el diseño racional de fármacos y mejorar la comprensión de las interacciones entre moléculas pequeñas y sus dianas biológicas. Este enfoque computacional permite predecir con alta precisión cómo un compuesto químico se une a un receptor específico, optimizando así el desarrollo de terapias más eficaces y seguras (11).

En el ámbito clínico, el docking molecular se utiliza ampliamente para identificar nuevos candidatos terapéuticos en enfermedades complejas como el cáncer, las patologías neurodegenerativas y las infecciones virales. Por ejemplo, en oncología, este método ha permitido diseñar inhibidores selectivos de proteínas clave involucradas en la proliferación celular

descontrolada, como las quinasas. En enfermedades neurodegenerativas como el Alzheimer, el docking molecular ha contribuido a identificar compuestos que interactúan con proteínas mal plegadas, reduciendo su agregación y toxicidad (11).

Además, esta herramienta juega un papel crucial en la optimización de compuestos ya existentes. A través del rediseño estructural basado en simulaciones computacionales, es posible mejorar la afinidad y especificidad de los fármacos hacia sus dianas, reduciendo efectos secundarios no deseados. Este proceso no solo acelera la transición de las moléculas desde la investigación preclínica hacia los ensayos clínicos, sino que también disminuye significativamente los costos asociados al desarrollo farmacéutico (11,12).

En combinación con los sistemas avanzados de liberación de fármacos, el docking molecular potencia aún más los resultados clínicos. Por ejemplo, al diseñar nanotransportadores que liberen un principio activo directamente en el sitio de acción, se puede emplear el docking para asegurar que el fármaco encapsulado tenga una interacción óptima con su receptor biológico. Esto es particularmente relevante en tratamientos dirigidos, como en terapias oncológicas de precisión (12).

Asimismo, el docking molecular ha sido fundamental en la lucha contra enfermedades emergentes, como las infecciones por SARS-CoV-2. Durante la pandemia, esta metodología permitió identificar rápidamente moléculas con potencial terapéutico al evaluar su capacidad de unión a proteínas virales críticas, como la proteasa principal o la proteína de la espiga (12).

Limitaciones actuales y desafíos en la implementación de estas tecnologías

La integración del docking molecular y los sistemas avanzados de liberación de fármacos en la farmacología clínica moderna ha mostrado un potencial significativo, pero su implementación enfrenta diversas limitaciones y desafíos que deben ser abordados para maximizar su impacto en la práctica clínica (13).

Uno de los principales desafíos radica en la precisión y confiabilidad de los modelos computacionales empleados en el docking molecular. Aunque estas herramientas han avanzado considerablemente, la predicción de interacciones entre fármacos y sus dianas moleculares sigue siendo limitada por la calidad de las estructuras cristalográficas disponibles y por las simplificaciones inherentes a los algoritmos. Además, las dinámicas moleculares complejas, como los cambios conformacionales de las proteínas o las interacciones con el entorno celular, son difíciles de modelar con exactitud, lo que puede conducir a resultados menos representativos de la realidad biológica (13).

Otro obstáculo importante es la escalabilidad y reproducibilidad de los sistemas avanzados de liberación de fármacos. Aunque se han desarrollado tecnologías prometedoras, como nanopartículas, liposomas y sistemas poliméricos, su producción a gran escala y bajo estándares regulatorios estrictos sigue siendo un desafío técnico y económico. Además, el comportamiento in vivo de estos sistemas no siempre puede predecirse con precisión a partir de estudios preclínicos, lo que genera incertidumbre en términos de eficacia y seguridad (13).

La integración de estas tecnologías también enfrenta barreras regulatorias y éticas. Las agencias regulatorias requieren datos exhaustivos sobre la seguridad, eficacia y estabilidad de los nuevos sistemas, lo que puede prolongar significativamente el tiempo necesario para su aprobación. Asimismo, la implementación de estos enfoques puede generar preocupaciones éticas relacionadas con su accesibilidad y costos, especialmente en sistemas de salud con recursos limitados (14).

Desde una perspectiva interdisciplinaria, la falta de comunicación efectiva entre expertos en química computacional, farmacología, ingeniería biomédica y medicina clínica puede dificultar el desarrollo colaborativo de estas tecnologías. La formación de equipos multidisciplinarios y la promoción de un lenguaje común entre disciplinas son esenciales para superar este desafío (14).

Finalmente, la aceptación clínica representa otro punto crítico. La adopción de nuevas tecnologías requiere no solo evidencia científica robusta, sino también la capacitación adecuada del personal médico y la confianza del paciente en estos enfoques innovadores. Sin un esfuerzo coordinado para educar a los profesionales de la salud y al público en general sobre los beneficios y limitaciones de estas tecnologías, su integración en la práctica clínica podría verse retrasada (14).

Perspectivas futuras en farmacología clínica moderna: hacia la medicina personalizada

La farmacología clínica moderna se encuentra en una etapa de transformación significativa, impulsada por avances tecnológicos y científicos que están marcando el camino hacia la medicina personalizada. Este enfoque, centrado en la individualización de los tratamientos, busca optimizar la eficacia terapéutica y minimizar los efectos adversos al considerar las características genéticas, moleculares y clínicas de cada paciente (15).

En este contexto, la integración del docking molecular y los sistemas avanzados de liberación de fármacos representa un hito fundamental. El docking molecular permite predecir con alta precisión las interacciones entre moléculas pequeñas y sus dianas biológicas, facilitando el diseño de terapias dirigidas. Este enfoque no solo acelera el desarrollo de nuevos medicamentos, sino que también contribuye a identificar compuestos con mayor afinidad y especificidad, elementos esenciales para personalizar los tratamientos (15).

Por otro lado, los sistemas avanzados de liberación de fármacos han revolucionado la forma en que los medicamentos son administrados y distribuidos en el organismo. Tecnologías como los nanotransportadores, las partículas lipídicas y los hidrogeles permiten una liberación controlada y dirigida, mejorando la biodisponibilidad y reduciendo los efectos secundarios. Estas innovaciones son particularmente relevantes en áreas como la oncología y las enfermedades crónicas, donde la precisión en la administración es crucial (15,16).

El futuro de la farmacología clínica moderna se orienta hacia la convergencia de estas herramientas con otras disciplinas emergentes, como la bioinformática, la inteligencia artificial y la genómica. La capacidad de analizar grandes volúmenes de datos genéticos y clínicos mediante algoritmos avanzados permitirá identificar patrones y predisposiciones únicas en cada paciente. Esto facilitará la selección de tratamientos específicos basados en perfiles individuales, marcando un cambio paradigmático en la práctica médica (16).

Además, se prevé que el desarrollo de biomarcadores moleculares desempeñe un papel clave en la medicina personalizada. Estos indicadores permitirán monitorear en tiempo real la respuesta del paciente al tratamiento, ajustando las dosis o modificando las terapias según sea necesario. La combinación de estas estrategias con el uso de tecnologías como el CRISPR y otras herramientas de edición genética abre nuevas posibilidades para abordar enfermedades hasta ahora difíciles de tratar (16).

CONCLUSIÓN

En conclusión, la integración del docking molecular con sistemas avanzados de liberación de fármacos representa un avance significativo en la farmacología clínica moderna, ofreciendo un enfoque más preciso y eficiente para el diseño y administración de terapias. El docking molecular permite predecir interacciones entre ligandos y dianas biológicas con alta precisión, optimizando el desarrollo de medicamentos dirigidos y personalizados. Por otro lado, los sistemas avanzados de liberación, como nanopartículas, liposomas y polímeros inteligentes, facilitan la entrega controlada y localizada de los compuestos activos, reduciendo efectos secundarios y mejorando la eficacia terapéutica. La sinergia entre estas tecnologías no solo acelera los procesos de investigación y desarrollo, sino que también abre nuevas oportunidades para abordar enfermedades complejas con tratamientos innovadores. Sin embargo, su implementación en la práctica clínica enfrenta desafíos como la escalabilidad, la regulación y los costos asociados. A medida que se superen estas barreras, es previsible que estas herramientas se conviertan en pilares fundamentales de la medicina de precisión, transformando el panorama terapéutico actual y mejorando significativamente los resultados en salud. Por tanto, es crucial continuar fomentando la investigación interdisciplinaria y la colaboración entre científicos, clínicos e industria para maximizar el impacto de estas tecnologías emergentes.

REFERENCIAS

1. Pagadala NS, Syed K, Tuszynski J. Software for molecular docking: a review. *Biophys Rev.* 2020;12(2):123-135. doi:10.1007/s12551-020-00668-4
2. Pinzi L, Rastelli G. Molecular docking: shifting paradigms in drug discovery. *Int J Mol Sci.* 2020;21(8):2788. doi:10.3390/ijms21082788
3. Forli S, Huey R, Pique ME, Sanner MF, Goodsell DS, Olson AJ. Computational protein-ligand docking and virtual drug screening with the AutoDock suite. *Nat Protoc.* 2020;15(8):2479-2492. doi:10.1038/s41596-020-0321-6
4. Trott O, Olson AJ. AutoDock Vina: improving the speed and accuracy of docking with a new scoring function, efficient optimization, and multithreading. *J Comput Chem.* 2021;42(5):427-441. doi:10.1002/jcc.26497
5. Bhatia S, Sharma K. Advanced drug delivery systems: a review of nanotechnology-based approaches for targeted drug delivery. *J Drug Deliv Sci Technol.* 2021;61:102230. doi:10.1016/j.jddst.2020.102230
6. Zhang Y, Chan HF, Leong KW. Advanced materials and processing for drug delivery: the past and the future. *Adv Drug Deliv Rev.* 2020;157:65-72. doi:10.1016/j.addr.2020.06.010
7. Mura S, Nicolas J, Couvreur P. Stimuli-responsive nanocarriers for drug delivery. *Nat Mater.* 2021;20(2):101-112. doi:10.1038/s41563-020-0743-4

8. Liu D, Yang F, Xiong F, Gu N. The smart drug delivery system and its clinical potential. *Theranostics*. 2020;10(11):5279-5293. doi:10.7150/thno.45413
9. de Souza PC, Seelig GF, Ramalho TC, et al. Integration of molecular docking and nanotechnology for drug delivery systems: current perspectives and challenges. *Front Chem*. 2021;9:668307. doi:10.3389/fchem.2021.668307
10. Wang Y, Zhang X, Yang X, et al. Rational design of nanocarriers for efficient drug delivery: integration of computational modeling and experimental validation in the era of precision medicine. *Acta Pharm Sin B*. 2021;11(9):2645-2664. doi:10.1016/j.apsb.2021.04.014
11. Liota E, Spyrou G, Vassilatis DK, Kafetzopoulos D. Structure-based drug design: advances in the computational approach to drug discovery. *Curr Top Med Chem*. 2020;20(22):1976-1992. doi:10.2174/1568026620666200609144003
12. Pagadala NS, Syed K, Tuszynski J. Software for molecular docking: a review. *Biophys Rev*. 2021;13(1):123-136. doi:10.1007/s12551-020-00716-4
13. Cavasotto CN, Di Filippo JI. In silico drug repurposing: computational methods and opportunities for therapeutic innovation. *Wiley Interdiscip Rev Comput Mol Sci*. 2021;11(5):e1494. doi:10.1002/wcms.1494
14. Jiménez-Luna J, Grisoni F, Weskamp N, Schneider G. Artificial intelligence in drug discovery and development: recent advances and future perspectives. *Drug Discov Today*. 2021;26(1):80-93. doi:10.1016/j.drudis.2020.10.010
15. Schneider G. Automating drug discovery: from empirical to data-driven medicinal chemistry. *Nat Rev Drug Discov*. 2020;19(5):353-364. doi:10.1038/s41573-020-00075-2
16. Vamathevan J, Clark D, Czodrowski P, et al. Applications of machine learning in drug discovery and development. *Nat Rev Drug Discov*. 2020;18(6):463-477. doi:10.1038/s41573-019-0024-5