

## Índice

Introducción <i>Dieter Rehder</i>	11
Prólogo <i>José Antonio Guevara García</i>	17
Historia del descubrimiento del vanadio <i>José Antonio Guevara García</i>	21
Introducción <i>José Antonio Guevara García</i>	31
CAPÍTULO I. ¿Son los Compuestos de vanadio fármacos potenciales? <i>Thomas Scior y José Antonio Guevara García</i>	39
1.1 Introducción	39
1.2 Química acuosa	42
1.3 Estabilidad de quelatos	44
1.4 Elemento fisiológico traza	45
1.5 Datos farmacológicos preliminares en el cuerpo humano	46
1.6 Toxicidad aguda	47
1.7 Toxicidad crónica	47
1.8 Acumulación	60
1.9 Enzimas como dianas específicas	62

1.10 Especificidad y selectividad	67
Notas finales	69
Conclusiones	72
Referencias	73
Abreviaturas	82
CAPÍTULO 2.	
Modelamiento teórico de un compuesto antidiabético	87
<i>Thomas Scior Jung y José Antonio Guevara García</i>	
Resumen	87
2.1 Vanadio y diabetes	88
2.2 Química cuántica computacional	91
2.3 Metodología	93
Resultados y discusión	94
Conclusiones	98
Referencias	99
CAPÍTULO 3.	
Diseño asistido por computadora de compuestos de vanadio no-peptídicos insulínomiméticos	105
<i>Thomas Scior Jung y José Antonio Guevara García</i>	
3.1 El principio insulínomimético	105
3.2 Diseño de fármacos asistido por computadora	109
3.3 Simulación de la interacción molecular PTP1B-compuestos de vanadio	111
Agradecimientos	116
Referencias	116

CAPÍTULO 4.	
Cálculos ab initio en complejos de vanadio	125
<i>María Eugenia Castro Sánchez</i>	
<i>y Francisco Javier Meléndez Bustamante</i>	
Resumen	125
4.1 Introducción	125
4.2 Métodos	127
4.3 Resultados	131
4.4 Conclusiones	133
Referencias	135
CAPÍTULO 5.	
Reporte de invención	139
<i>Enrique González Vergara</i>	
5.1 Vanadio	139
5.2 Diabetes	142
5.3 Descripción técnica	143
Resultados	144
Conclusiones	153
5.4 Ventajas y desventajas	153
5.5 Aspectos técnicos	154
Anexos	157
Referencias	158
Conclusiones	161
<i>Thomas Scior y José Antonio Guevara-García</i>	
Semblanza de los autores	167
Producción de los autores respecto al tema	171