Investigadores de la UEx publican importantes resultados en la lucha contra el cáncer, prediciendo actividades biológicas gracias a LUSITANIA

- Tue, 18/10/2016



Los iminoazúcares son derivados de carbohidratos con interesantes propiedades biológicas, ya que a menudo se comportan como potentes inhibidores de glicosidasas, enzimas implicadas en un gran número de procesos biológicos. En concreto, la inhibición de β-N-acetilhexosaminidasas constituye una novedosa estrategia para el tratamiento de metástasis asociadas a ciertos procesos cancerígenos.

El Departamento de Química de la Universidad de Oxford [1], en colaboración con el grupo QUOREX [2] de la Universidad de Extremadura, ha elaborado un estudio, con la ayuda del Supercomputador LUSITANIA [3], en el que se han establecido los requerimientos estructurales esenciales para la actividad biológica de varios tipos de iminoazúcares derivados de ácidos pipecólicos, prolinas y azetidinas como inhibidores de β-N-acetilhexosaminidasas.

Concretamente, LUSITANIA ha permitido predecir de manera cualitativa la actividad biológica de los compuestos estudiados en función de su estructura tridimensional modelizada. Además, algunos de los derivados preparados han reducido de forma considerable la invasión celular de una línea tumoral especialmente agresiva, lo que parece indicar que podría considerarse como una estrategia antimetastática viable.

Este estudio ha sido publicado recientemente en la prestigiosa revista internacional Organic & Biomolecular Chemistry [4]:

- A. F. G. Glawar, R. F. Martínez, B. J. Ayers, M. A. Hollas, N. Ngo, S. Nakagawa, A. Kato, T. D. Butters, G. W. J. Fleet and S. F. Jenkinson. Structural essentials for β-N-acetylhexosaminidase inhibition by amides of prolines, pipecolic and azetidine carboxylic acids [5]. Organic & Biomolecular Chemistry, 2016, DOI: 10.1039/C6OB01549B.

Noticias relacionadas:

- El supercomputador Lusitania aporta nuevamente su capacidad de cálculo a la lucha contra el cáncer [Junta de Extremadura [6]] [Extremadura.com [7]]
- El supercomputador extremeño Lusitania II colabora en la lucha contra el cáncer [El Periódico Extremadura [8]] [La crónica de Badajoz] [9]
- El supercomputador extremeño Lusitania II aporta simulaciones en la investigación en la lucha contra el cáncer [El correo Extremadura [10]] [Región digital [11]] [Directo Extremadura [12]]
- Supercomputador estremenho Lusitania fornece a sua capacidade na luta contra o cancro [Agencia EFE Portugal [13]]
- Un supercomputador español para la lucha contra el cáncer [Datacenter Dynamics [14]]

Source URL:https://www.cenits.es/en/noticias/18102016-investigadores-uex-publican-importantes-resultados-lucha-contra-cancer-prediciendo

Links
[1] http://www.chem.ox.ac.uk/ [2] http://www.unex.es/investigacion/grupos/quorex [3] http://www.cenits.es/cenits/supercomputacion-en-extremadura [4] http://pubs.rsc.org/en/journals/journalissues/ob#!recentarticles&adv [5] http://pubs.rsc.org/en/content/articlelanding/2016/ob/c6ob01549b [6] http://www.gobex.es/comunicacion/noticia?idPub=20272#.WAin-KQXY8o.twitter [7] http://www.extremadura.com/noticias/2016/10/20/el-supercomputador-lusitania-aporta-nuevamente-su-capacidad-de-calculo-a-la-lucha-contra-el-cancer [8] http://www.elperiodicoextremadura.com/noticias/extremadura/supercomputador-extremeno-lusitania-ii-colabora-lucha-cancer_970149.html [9] http://www.lacronicabadajoz.com/noticias/extremadura/supercomputador-extremeno-lusitania-ii-colabora-lucha-cancer_237152.html [10] http://www.elcorreoextremadura.com/noticias_region/2016-10-20/10/18973/el-supercomputador-extremeno-lusitania-ii-aporta-simulaciones-en-la-investigacion-en-la-lucha-contra-el-cancer.html [11] http://

www.regiondigital.com/noticias/portada/261843-el-supercomputador-extremeno-lusitania-ii-aporta-simulaciones-en-la-investigacion-en-la-lucha-contra-el-cancer.html [12] http://www.directoextremadura.com/noticias_region/2016-10-20/10/13329/el-supercomputador-extremeno-lusitania-ii-aporta-simulaciones-en-la-investigacion-en-la-lucha-contra-el-cancer.html [13] http://www.efe.com/efe/portugal/estremadura/supercomputador-estremenho-lusitania-fornece-a-sua-capacidade-na-luta-contra-o-cancro/50000446-3073235 [14] http://www.datacenterdynamics.es/focus/archive/2016/10/un-supercomputador-espa%C3%B1ol-para-la-lucha-contra-el-c%C3%A1ncer