

**INVESTIGACIÓN** DISEÑO DE FÁRMACOS

Una simulación reproduce la unión de una molécula pequeña a su proteína diana

Redacción

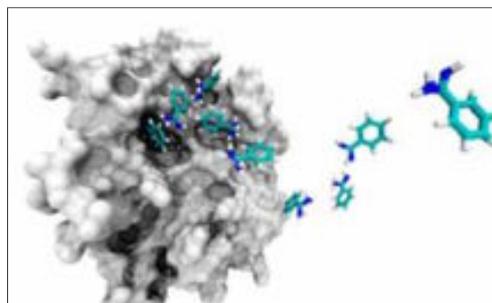
Un grupo del Instituto de Investigación Hospital del Mar (IMIM) y la Universidad Pompeu Fabra (UPF), de Barcelona, ha conseguido reproducir y reconstruir un proceso completo de la unión de una molécula pequeña a su proteína diana. Este avance permite calcular la afinidad y el tiempo de unión del fármaco con la proteína y conocer qué interacciones establece el fármaco para actuar, permitiendo así avanzar hacia el diseño más seguro y eficiente de nuevos medicamentos.

El trabajo, que se publica en la versión electrónica de *Proceedings of the National Academy of Sciences*, ayuda a visualizar un proceso que hasta ahora era invisible y por lo tanto desconocido, abriendo una nueva vía en el diseño de nuevos medicamentos.

La unión de un medicamento, que por lo general suele ser una molécula pequeña, a su proteína diana es un proceso muy dinámico y depende de interacciones a escala nanométrica y pasa a escalas de tiempo del orden de nano/microsegundos. Además, la captura de los movimientos de las moléculas pequeñas con una resolución de hasta un átomo está más allá de las capacidades técnicas actuales. Sin embargo, mediante técnicas informáticas es posible representar las moléculas en su escala atómica y reproducir sus movimientos con una alta precisión matemática.

La comprensión de cómo se produce la unión de una proteína y una molécula, esta última provocando una respuesta biológica al ser reconocida por la primera, es de vital importancia para el diseño de nuevos medicamentos. A pesar del progreso de la técnica, hasta ahora ningún estudio había proporcionado una completa reconstrucción de un proceso de unión proteína-ligando. "El método proporciona no sólo la afinidad de unión y la cinética de la reacción, sino también información de la resolución atómica durante el proceso: sitios de unión, estados de transición y estados metaestables son potencialmente útiles para ampliar la probabilidad de éxito en el diseño de fármacos. Esta metodología es directamente aplicable a otros sistemas moleculares, y por tanto de interés general en la investigación biomédica y farmacéutica", ha explicado Gianni de Fabritiis, coordinador del Laboratorio de Biofísica Computacional del Programa de Investigación en Informática Biomédica, en el IMIM y la UPF.

Los científicos trabajan ahora para ampliar la aplicación de esta metodología y así aprovechar mejor las capacidades de la computación, ya que en los casos en que los ligandos son más grandes y flexibles y donde las proteínas presentan los procesos de unión más compleja se requiere todavía un mayor esfuerzo computacional.



La molécula hexagonal pequeña (benzamidina) es el ligando/inhibidor. En gris se ve la proteína tripsina.



Investigadores españoles logran avances en el diseño eficiente de fármacos

Efe

BARCELONA

Investigadores del Instituto de Investigación del Hospital del Mar y de la Universidad Pompeu Fabra han logrado reproducir un proceso completo de la unión de un fármaco con la proteína a la que va dirigida, lo que puede permitir avanzar en un diseño más seguro y eficiente de nuevos medicamentos.

La investigación, que ayer publica la revista *Proceedings of the National Academy of Sciences* (PNAS) se hizo que realizar con técnicas informáticas ya que experimentalmente no se puede ver, de forma que en la simulación del ensayo utilizaron tarjetas gráficas. El coordinador de la investigación expresó su esperanza de que estos ensayos puedan llevarse lo antes posible a la práctica.

Viu La Primavera cultural 2011! Del 18 de març al 30 de juny.



lamalla.cat

LES COSES, TAL COM SÓN

Dimarts, 7 de juny de 2011

lamalla.tv fotos blocs participació serveis el +vist al minut

INFOLOCAL POLÍTICA SOCIETAT INTERNACIONAL ECONOMIA MEDI AMBIENT CULTURA MÈDIA DIGITALS I CIÈNCIA ESPORTS MÉS SECCIONS

lamalla.cat > Societat > Salut

07/06/2011 06:00h

L'Hospital del Mar i UPF descobreixen un disseny més eficient dels fàrmacs

Els científics han aconseguit reproduir com un fàrmac s'uneix a una proteïna

LAMALLA.CAT / AGÈNCIES

[Doble clic sobre
cualquier palabra](#)

[Clica aquí per
escaltar](#)



Investigadors de l'Institut d'Investigació de l'Hospital del Mar i de la Universitat Pompeu Fabra (UPF) han aconseguit reproduir un procés complet de la unió d'un fàrmac amb la proteïna a la qual va dirigida, fet que pot permetre avançar en un disseny més segur i eficient de nous medicaments.

La investigació, que publica aquest dilluns la revista "Proceedings of the National Academy of Sciences" ha estat coordinada pel científic Gianni de Fabritiis, coordinador del Laboratori de Biofísica Computacional del Programa d'Investigació i Informàtica de l'Institut d'Investigació de l'Hospital del Mar i de la UPF. De Fabritiis ha explicat que l'estudi s'ha hagut de realitzar amb tècniques informàtiques ja que experimentalment no es pot veure, de forma que en la simulació de l'assaig s'han emprat targetes gràfiques.

El coordinador de la investigació ha expressat la seva esperança que aquests assajos es puguin dur a la pràctica al més aviat possible: "esperem col·laborar amb empreses farmacèutiques perquè el disseny de fàrmacs es pugui optimitzar més fàcilment", ha dit.

Gianni de Fabritiis creu que els resultats de la investigació suposen una eina nova en la fase de desenvolupament del fàrmac, ja que fins ara en el procés de disseny d'un fàrmac es feien servir "altres eines, però que no són tan exactes com aquesta".

L'investigador s'ha mostrat esperançat que l'estudi pugui ajudar a "canviar molt la manera de desenvolupar un fàrmac, pot escurçar el temps d'investigació i fer-lo més econòmic". Aquest avanç permet calcular l'afinitat i el temps d'unió del fàrmac amb la proteïna i conèixer quines interaccions estableix el fàrmac per actuar, tot permetent avançar cap a un disseny més segur i eficient de nous medicaments.

L'assaig ajuda a veure un procés que fins ara era invisible i per tant desconegut, obrint així una nova via en el disseny de nous medicaments. El procés d'unió d'un medicament, en general una molècula petita a la seva proteïna diana és molt dinàmic i depèn d'interaccions a escala nanomètrica (mil milions de vegades més petit que un metre) i passa a escales de temps de l'ordre de nano/microsegons (milers de milions de vegades més ràpid que un segon).

La captura de moviments de molècules petites amb una resolució de fins un àtom està més enllà de les capacitats tècniques actuals. No obstant, mitjançant tècniques informàtiques és possible representar les molècules en la seva escala atòmica i reproduir els seus moviments amb una alta precisió matemàtica.

Publicat 07/06/2011 06:00h



XN/Arxiu

PUBLICITAT

902 40 44 45

La teva moto des de **114€**

El teu cotxe des de **200€**

Calcula aquí la teva assegurança

FÈNIX DIRECTO

+Vist Al minut Enquesta

- Una estampa de l'Opus Dei deixa ERC sense regidors a Girona
- El Vendrell, un dels municipis on es pot trencar la regla de la força més votada
- Un jove del PSC d'Esplugues es vol batre amb Rubalcaba a les primàries
- Un jove mor a trets en un bar de Girona
- Els nous convenis col·lectius potenciaran la flexibilitat interna de les empreses
- Mercè Sampietro torna als escenaris
- L'Hospital del Mar i UPF descobreixen un disseny més eficient dels fàrmacs
- Demanen buscar petroli en algunes zones de Lleida
- Miki Roqué rep l'alta hospitalària
- Comença el Saló Internacional de la Logística amb l'objectiu de desafiar la crisi

Sepromark - Club de Marketing Farmacéutico

- [Hazte socio !](#)
- [Zona de socios](#)
- [Blogs de Socios](#)

-  [Inicio](#)

- [Actos realizados](#)
- [Noticias](#)
- [Cursos y Eventos](#)
- [Enlaces de interés](#)
- [Estatutos del Club](#)
- [Junta Directiva](#)
- [Directorio de socios](#)
- [Contacto](#)



NOTICIAS

 [Versión para imprimir](#)

Investigadores españoles abren una nueva vía de diseño de fármacos

7 Jun. 2011

Investigadores del Instituto de Investigación Hospital del Mar (IMIM) y la Universitat Pompeu Fabra de Barcelona han conseguido reproducir y reconstruir el proceso completo de la unión de una molécula pequeña a su proteína diana, lo que abre una nueva vía en el diseño de nuevos fármacos.

Este avance permite calcular la afinidad y el tiempo de unión del fármaco con la proteína y conocer qué interacciones establece el fármaco para actuar, permitiendo así avanzar hacia el diseño más seguro y eficiente de nuevos fármacos.

Este innovador trabajo ayuda a ver un proceso que hasta ahora era invisible, y se basa en la captura de movimientos de moléculas pequeñas con una resolución de hasta un átomo, más allá de las capacidades técnicas actuales.

Mediante técnicas informáticas es posible representar las moléculas en su escala atómica y reproducir sus movimientos con una alta precisión matemática.

La comprensión de cómo se produce la unión de una proteína y una molécula, esta última provocando una

respuesta biológica al ser reconocida por la primera, es de vital importancia para el diseño de nuevos medicamentos.

A pesar del progreso de la técnica, hasta ahora, ningún estudio había proporcionado una reconstrucción completa del citado proceso.

"El método proporciona no sólo la afinidad de unión y la cinética de la reacción, sino también información de la resolución atómica durante el proceso: sitios de unión, estados de transición y estados metaestables", ha explicado el coordinador del Laboratorio de Biofísica Computacional del Programa de Investigación en Informática Biomédica del IMIM y la UPF, Gianni de Fabritiis.

El coordinador ha destacado que esta metodología es directamente aplicable a otros sistemas moleculares, y, por tanto, de interés general en la investigación biomédica y farmacéutica.

Últimas noticias

8 Jun.

[El CEO de Cephalon podría llegar hasta los 14 millones de dólares de indemnización tras el acuerdo con Teva](#)

8 Jun.

[Grifols nombra a Thomas Glanzmann como presidente de su nueva junta directiva para operaciones en EE. UU.](#)

7 Jun.

[Sólo el 40 por ciento de los pacientes continúa el tratamiento después de seis meses](#)

7 Jun.

[Investigadores españoles abren una nueva vía de diseño de fármacos](#)

7 Jun.

[Daiichi Sankyo prepara su introducción en oncología y refuerza sus actividades en el área cardiovascular](#)

6 Jun.

[Pfizer apuesta por la formación de los pacientes con problemas respiratorios crónicos](#)

6 Jun.

[Archimedes Pharma lanza en España PecFent para el tratamiento del dolor irruptivo oncológico](#)

6 Jun.

[La italiana Sigma-Tau podría vender participaciones de la compañía](#)

6 Jun.

[Internet impulsa la inversión publicitaria en el primer trimestre de 2011](#)

3 Jun.

[Ogilvy Healthworld y CommonHealth se fusionan para crear la mayor red mundial de comunicación y marketing de la salud](#)

3 Jun.

[Sanofi cambia la estructura de Genzyme](#)

3 Jun.

[Tony Blair, Manel Estiarte y Anita Goel protagonistas en el IV Foro Novartis de Excelencia](#)

[Home](#) » [Noticias](#) » [Investigadores españoles abren una...](#)[Enviar a un amigo](#) | [Imprimir en PDF](#)

07 Jun. 2011

Investigadores españoles abren una nueva vía de diseño de fármacos

Investigadores del Instituto de Investigación Hospital del Mar (IMIM) y la Universitat Pompeu Fabra de Barcelona han conseguido reproducir y reconstruir el proceso completo de la unión de una molécula pequeña a su proteína diana, lo que abre una nueva vía en el diseño de nuevos fármacos.

Este avance permite calcular la afinidad y el tiempo de unión del fármaco con la proteína y conocer qué interacciones establece el fármaco para actuar, permitiendo así avanzar hacia el diseño más seguro y eficiente de nuevos fármacos.

Este innovador trabajo ayuda a ver un proceso que hasta ahora era invisible, y se basa en la captura de movimientos de moléculas pequeñas con una resolución de hasta un átomo, más allá de las capacidades técnicas actuales.

Mediante técnicas informáticas es posible representar las moléculas en su escala atómica y reproducir sus movimientos con una alta precisión matemática.

La comprensión de cómo se produce la unión de una proteína y una molécula, esta última provocando una respuesta biológica al ser reconocida por la primera, es de vital importancia para el diseño de nuevos medicamentos.

A pesar del progreso de la técnica, hasta ahora, ningún estudio había proporcionado una reconstrucción completa del citado proceso.

"El método proporciona no sólo la afinidad de unión y la cinética de la reacción, sino también información de la resolución atómica durante el proceso: sitios de unión, estados de transición y estados metaestables", ha explicado el coordinador del Laboratorio de Biofísica Computacional del Programa de Investigación en Informática Biomédica del IMIM y la UPF, Gianni de Fabritiis.

El coordinador ha destacado que esta metodología es directamente aplicable a otros sistemas moleculares, y, por tanto, de interés general en la investigación biomédica y farmacéutica.

Arquitectura (+ Business)

IE University: gana ventaja competitiva e independencia

Su Proyecto Web solo 499€

Web + Dominio + Hosting + Email + Alta en Buscadores + SEO

Categorías:

Mercado

Noticias relacionadas

Proyectan fuerte crecimiento en medicamentos

La resistencia a los antibióticos, un tema que alarma y avanza en el país

La OPS elogió el programa de trazabilidad de medicamentos argentino

APM: negociaciones frías y salarios

[Me gusta](#)

0 tweet

(0 comentarios)

Nombre

Email

 Enviarme un email cuando alguien conteste a este tema.

Categorías

TODAS

Digestivo y Metabolismo
Sangre y Hematología
Cardiovascular
Dermatología
Empresas
Mercado
Servicios
Genito urinario
Hormonas no sexuales
Antiinfecciosos
Cáncer
Osteomuscular
Sistema nervioso
Respiratorio
Órganos de los sentidos
Varios y Miscelánea

Foro de Farmacéuticos

Espacio de Opinión y Participación Para Profesionales Farmacéuticos.
www.CorreoFarmaceutico.com/Foro

Su Proyecto Web solo 499€

Web + Dominio + Hosting + EMail + Alta en Buscadores + SEO
www.multimediasolutions.es

Lo + comentado

Lo + leído

Las noticias más comentadas.

Antitabaco: prohibición de ANMAT y fair play

6 comentarios

Amgen recibe la opinión positiva del CHMP para Xgeva (denosumab) en la Unión Europea

1 comentarios

Aprobaban el uso de Botox para tratar la migraña crónica

1 comentarios

El fármaco para esclerosis múltiple de Novartis, Gileña, ya posee 10.000 pacientes en los EEUU

0 comentarios

Nestlé Health Science adquiere la empresa americana líder en diagnóstico gastrointestinal

0 comentarios

Zumbido en los oídos: Tinnitus

0 comentarios

Profármaco confía en Vincle para aportar valor al proceso de visita médica

0 comentarios

La Comisión Europea aprueba Eliquis (apixaban) para prevenir el tromboembolismo venoso tras la cirugía electiva de reemplazo de cadera o rodilla

0 comentarios

Sanofi y Orange apuestan por la innovación para facilitar al médico la gestión del paciente diabético

0 comentarios

UCB comparará Cimzia con Humira, de Abbott, para intentar arrebatarle su liderazgo

0 comentarios

[Inicio](#)[Noticias](#)[Alertas de publicaciones](#)[Reportajes](#)[Entrevistas](#)[Actividades](#)[Vídeos](#)[Imágenes](#)[Tribuna](#)**Biomedicina y Salud** | Otras especialidades médicas

La investigación se ha publicado en 'PNAS'

Un gran paso en la simulación molecular para el diseño de nuevos fármacos

Científicos del Instituto de Investigación Hospital del Mar (IMIM) y la Universidad Pompeu Fabra (UPF) han conseguido reproducir y reconstruir un proceso completo de la unión de una molécula pequeña a su proteína diana. Este avance permite calcular la afinidad y el tiempo de unión del fármaco con la proteína y conocer qué interacciones establece el fármaco para actuar, permitiendo así avanzar hacia el diseño más seguro y eficiente de nuevos medicamentos.

IMIM | Cataluña | 06.06.2011 14:09



El proceso de unión de un medicamento, en general una molécula pequeña, a su proteína diana es muy dinámico y depende de interacciones a escala nanométrica (mil millones de veces más pequeño que un metro) y pasa a escalas de tiempo de la orden de nano/micro-segundos (miles de millones de veces más rápido que un segundo). La captura de movimientos de moléculas pequeñas con una resolución de hasta un átomo, está más allá de las capacidades técnicas actuales. Sin embargo, mediante técnicas informáticas, es posible representar las moléculas en su escala atómica y reproducir sus movimientos con una alta precisión matemática.

La comprensión de cómo se produce la unión de una proteína y una molécula, esta última provocando una respuesta biológica al ser reconocida por la primera (ligando), es de vital importancia para el diseño de nuevos medicamentos. A pesar del progreso de la técnica, hasta ahora, ningún estudio había proporcionado una completa reconstrucción de un proceso de unión proteína-ligando.

"El método proporciona no sólo la afinidad de unión y la cinética de la reacción, sino también información de la resolución atómica durante el proceso: sitios de unión, estados de transición y estados metaestables son potencialmente útiles para ampliar la probabilidad de éxito en el diseño de fármacos. Esta metodología es directamente aplicable a otros sistemas moleculares, y por tanto de interés general en la investigación biomédica y farmacéutica" explica Gianni de Fabritiis, coordinador del Laboratorio de Biofísica Computacional del Programa de Investigación en Informática Biomédica (GRIB) del Instituto de Investigación Hospital del Mar (IMIM) y la Universidad Pompeu Fabra (UPF).

Los investigadores trabajan ahora para ampliar la aplicabilidad de esta metodología y aprovechar mejor las capacidades de computación, ya que en los casos en que los ligandos son más grandes y flexibles y donde las proteínas presentan los procesos de unión más compleja, se requiere todavía un mayor esfuerzo computacional.

Artículo de referencia:

"Complete reconstruction of an enzyme-inhibitor binding process by molecular dynamics simulations" I. Buch, T. Giorgino, G. De Fabritiis. www.pnas.org/cgi/doi/10.1073/pnas.1103547108

Imagen adjunta: La molécula hexagonal pequeña (benzamidina) es el ligando/inhibidor, lo que sería un fármaco. En gris azulado vemos la proteína llamada tripsina. A parte de proteína, es una enzima y su función es cortar otras proteínas. Cuando la benzamidina se une a la tripsina, evita que otras proteínas se unan y por tanto que la tripsina las pueda cortar. Haciendo esto, está inhibiendo la función de tripsina. El trabajo demuestra que para poder unirse a la tripsina, la benzamidina primero interacciona con diversas regiones que ayudan a canalizarla a su sitio final de unión y por consiguiente de inhibición.

Video en: <http://youtu.be/zKNmBjqGijl>

Fuente: IMIM

Comentarios

[Conectar](#) o [crear una cuenta de usuario](#) para comentar.

Conectar

usuario

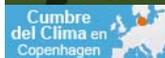
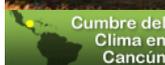
contraseña

[Recordar contraseña](#)

[Entrar](#)

Registro

[Para instituciones](#)
[Para periodistas](#)
[Para invitados](#)



>convertir en página de inicio

Actualizado: Madrid 16:00
Nueva York 10:00
Tokio 23:00

^Buscar nuestro archivo (4.642.706 titulares)

Una Página de Noticias > Salud > Investigadores españoles abren una nueva vía de diseño

¡BYE BYE CELULITIS! ~~99€~~
CAVITACIÓN 22€



LetsBonus
Compra Online

Anuncios C

- Letshonus.com
- España
- Noticias portada
- Mi Escritorio
- Imágenes*nuevo
- En Noticias*nuevo
- Crisis Del Pepino
- Dieta Dukan
- Sandra Palo
- Marta Fernández
- El Rocío
- Hugh Hefner
- Secciones
- Últimas noticias
- Nacional
- Economía y Finanzas
- Últimas Deportes
- Noticias Mundial
- Estilo de Vida
- Cultura
- Espectáculos
- Sociedad
- Salud
- Gente
- Tecnología
- Noticias corporativas

Investigadores españoles abren una nueva vía de diseño (la noticia)

Investigadores españoles abren una nueva vía de diseño de fármacos

ep europa press

Martes, 7 de Junio de 2011 (hace 1 día)

BARCELONA, 7 Jun. (EUROPA PRESS) - Investigadores del Instituto de Investigación Hospital del Mar (IMIM) y la Universitat Pompeu Fabra de Barcelona han conseguido reproducir y reconstruir el proceso completo de la unión de una molécula pequeña a su proteína diana, lo que abre una nueva vía en el diseño de nuevos fármacos.

Acceso original artículo de noticias

Sé el primero de tus amigos a quien le gusta esto.



Sesión iniciada como De Melero

Añadir un comentario...



Publicar un comentario en mi perfil de Facebook

Plug-in social de Facebook

0 0

Noticias relacionadas mas recientes

La nueva temporada de la Orquesta de la Comunidad tendrá 7 estrenos españoles

La nueva temporada de la Orquesta de la (la noticia)

La Orquesta y Coro de la Comunidad de Madrid (Orcam) estrenará siete obras de compositores españoles para la próxima temporada que se iniciará el próximo...
Informado por ADN.es hace 8 minutos - Espana

También se informado por •Las Provincias

Investigadores españoles inician un estudio para conocer los beneficios reales para la salud de algunos alimentos

Investigadores españoles inician un estudio para conocer los (la noticia)

El Hospital Universitario Ramón y Cajal de Madrid ha firmado un convenio de colaboración con la empresa 2B Blackbio para iniciar el proyecto 'Henufood', con el...
Informado por Terra España hace 2 horas - Destacados

La nueva Aena Aeropuertos inicia este miércoles su actividad como gestor aeroportuario

La nueva Aena Aeropuertos inicia este miércoles su (la noticia)

Aena Aeropuertos inicia este miércoles de manera efectiva sus funciones y obligaciones de gestión aeroportuaria en los 47 aeropuertos de la red, tareas que...
Informado por Terra España hace 5 horas - Espana

HESIC
BUSINESS & MARKETING SCHOOL

Máster en

Dirección de Marketing y Gestión Comercial

Abierta Convocatoria Infórmate Ahora

Coches Lexus Premium

La búsqueda de la perfección. Lexus. La búsqueda de la perfección
www.mundolexus.com

Anuncios Google



Instituto de la Ciencia y la Tecnología
Multiparalelo, creado desde 1977

Martes, 7 junio 2011

Última actualización: Martes, 7 junio 2011

HEMEROTECA | PUBLICIDAD |

Portada Ciencia Tecnología Medio Ambiente Salud Artículos Blogs Libros Reproducción de Noticias

Arqueología | Astron. y Espacio | Biología | C. Materiales | Física | Geología | Matemáticas | Paleontología | Política C. | [Química](#) | Zoología |

Martes, 7 junio 2011

BIOQUÍMICA

Un gran paso en la simulación molecular para el diseño de nuevos fármacos

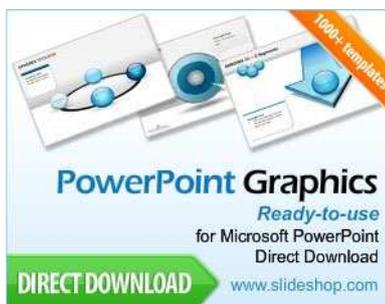
Científicos del Instituto de Investigación Hospital del Mar (IMIM) y la Universidad Pompeu Fabra (UPF) han conseguido reproducir y reconstruir un proceso completo de la unión de una molécula pequeña a su proteína diana. Este avance permite calcular la afinidad y el tiempo de unión del fármaco con la proteína y conocer qué interacciones establece el fármaco para actuar, permitiendo así avanzar hacia el diseño más seguro y eficiente de nuevos medicamentos.

El proceso de unión de un medicamento, en general una molécula pequeña, a su proteína diana es muy dinámico y depende de interacciones a escala nanométrica (mil millones de veces más pequeño que un metro) y pasa a escalas de tiempo de la orden de nano/micro-segundos (miles de millones de veces más rápido que un segundo). La captura de movimientos de moléculas pequeñas con una resolución de hasta un átomo, está más allá de las capacidades técnicas actuales. Sin embargo, mediante técnicas informáticas, es posible representar las moléculas en su escala atómica y reproducir sus movimientos con una alta precisión matemática.

La comprensión de cómo se produce la unión de una proteína y una molécula, esta última provocando una respuesta biológica al ser reconocida por la primera (ligando), es de vital importancia para el diseño de nuevos medicamentos. A pesar del progreso de la técnica, hasta ahora, ningún estudio había proporcionado una completa reconstrucción de un proceso de unión proteína-ligando.

"El método proporciona no sólo la afinidad de unión y la cinética de la reacción, sino también información de la resolución atómica durante el proceso: sitios de unión, estados de transición y estados metaestables son potencialmente útiles para ampliar la probabilidad de éxito en el diseño de fármacos. Esta metodología es directamente aplicable a otros sistemas moleculares, y por tanto de interés general en la investigación biomédica y farmacéutica", explica Gianni de Fabritiis, coordinador del Laboratorio de Biofísica Computacional del Programa de Investigación en Informática Biomédica (GRIB) del Instituto de Investigación Hospital del Mar (IMIM) y la Universidad Pompeu Fabra (UPF).

Los investigadores trabajan ahora para ampliar la aplicabilidad de esta metodología y aprovechar mejor las capacidades de computación, ya que en los casos en que los ligandos son más grandes y flexibles y donde las proteínas presentan los procesos de unión más compleja, se requiere todavía un mayor esfuerzo computacional. (Fuente: IMIM)



Salud

Cerebros a -80 grados

Ratifican que los recuerdos falsos poseen menor riqueza de detalles sensoriales y de otro tipo

Observando a sus bebés, las madres adolescentes pueden aprender mucho sobre cómo ejercer su maternidad

La nicotina también llega al cerebro de los fumadores pasivos, no sólo al de los activos

La musicoterapia alivia los síntomas de la fibromialgia y mejora la calidad de vida de los enfermos

¿Debería Alemania indemnizar a los exportadores españoles?



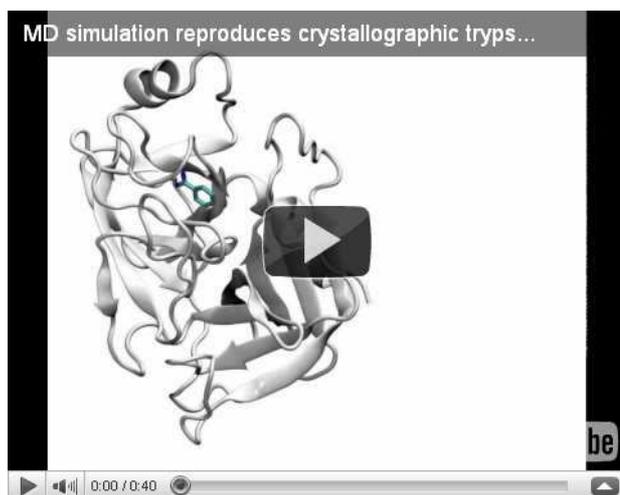
Vota y podrás ganar un Mercedes

Sí

No

Vodafone ADSL
Máxima Velocidad





Anuncios Google

- [Cat](#)
- [TV3](#)
- [Cat Is Cat](#)
- [Cat Online Test](#)

Copyright © 1996-2011 NCYT | (Noticiasdelaciencia.com / Amazings.com). Todos los derechos reservados.

Depósito Legal B-47398-2009, ISSN 2013-6714

Todos los textos y gráficos son propiedad de sus autores. Prohibida la reproducción total o parcial por cualquier medio sin consentimiento previo por escrito.

Excepto cuando se indique lo contrario, la traducción, la adaptación y la elaboración de texto adicional de este artículo han sido realizadas por el equipo de NCYT.

Comparte esta noticia:



¡Deje su comentario!

Email (No será publicado):

Nombre:

Comentario:

Enviar comentario

Más contenido de Noticiasdelaciencia.com: [HEMEROTECA](#) | [NOSOTROS](#) | [PUBLICIDAD](#) | [CONTACTO](#)

Noticiasdelaciencia.com • Términos de uso • Política de Privacidad • Mapa del sitio
© 2011 • Todos los derechos reservados - Depósito Legal B-47398-2009, ISSN 2013-6714



Investigadores españoles logran avances en el diseño eficiente de fármacos

01:10 ☆☆☆☆☆

me gusta



EFE | BARCELONA Investigadores del Instituto de Investigación del Hospital del Mar y de la Universidad Pompeu Fabra han logrado reproducir un proceso completo de la unión de un fármaco con la proteína a la que va dirigida, lo que puede permitir avanzar en un diseño más seguro y eficiente de nuevos medicamentos.

La investigación, que ayer publica la revista Proceedings of the National Academy of Sciences (PNAS) se hizo que realizar con técnicas informáticas ya que experimentalmente no se puede ver, de forma que en la simulación del ensayo utilizaron tarjetas gráficas. El coordinador de la investigación expresó su esperanza de que estos ensayos puedan llevarse lo antes posible a la práctica.

Anuncios Google

Avances celulas madre

Banco cordón umbilical. Fuente de salud para su familia. Contáctenos! www.bancodecordonivida.com

Instituto Clínico Capilar

Depilación Láser, Tratamientos y Microinjerto Capilar Garantizado. www.Instituto-Capilar.com

Masters en Farmacia 2011

Masters Industria Farmacéutica 2011 Presencial/Online. ¡Infórmate Aquí! www.mejoresmaster.com/Farmacia

COMPARTIR



¿qué es esto?

ENVIAR PÁGINA »

IMPRIMIR PÁGINA »

AUMENTAR TEXTO »

REDUCIR TEXTO »

VER MÁS OFERTAS AQUÍ



Padre de Familia -
Un regalo muy especial.



Adaptador de Red.
Cómpralo cómodamente online.



Bolso Rociero Picado.
Artículos de Valverde del Camino.

HEMEROTECA

Volver a la Edición Actual

Síguenos en las redes sociales:

Vídeos de Actualidad



DESTACADOS



EL TIEMPO
Consulta la predicción meteorológica



EN MI OPINIÓN
Envía tus propios artículos



AGENDA
Disfruta de tu tiempo libre



BLOGS
Sigue las bitácoras más interesantes

ESPECIAL LOTERÍAS Y APUESTAS



Loterías y apuestas

Consulta los resultados de los principales sorteos de la lotería y la quiniela.

WIDGETS

- Igoogle**
Personaliza tu página de inicio de Google con las últimas noticias
- www**
Llévate las noticias de laopinioncoruna.es a tu web
- Rss**
Sigue las noticias de laopinioncoruna.es a través de RSS

ANUNCIOS GOOGLE

Avances celulas madre
Banco cordón umbilical. Fuente de salud para su familia. Contáctenos!
www.bancodecordonivida.com

Instituto Clínico Capilar
Depilación Láser, Tratamientos y Microinjerto Capilar Garantizado.
www.Instituto-Capilar.com

Masters en Farmacia 2011
Masters Industria Farmacéutica 2011 Presencial/Online. ¡Infórmate Aquí!
www.mejoresmaster.com/Farmacia

Enlaces recomendados: Hoteles Baratos | Cta NARANJA de ING 3,5% TAE 4 meses Sin comisiones | DEPOSITOS Open 4%



laopinioncoruña.es es un producto de Editorial Prensa Ibérica
Queda terminantemente prohibida la reproducción total o parcial de los contenidos ofrecidos a través de este medio, salvo autorización expresa de laopinioncoruña.es. Así mismo, queda prohibida toda reproducción a los efectos del artículo 32.1, párrafo segundo, Ley 23/2006 de la Propiedad Intelectual.

Adaptado a la Ley de Protección de Datos por



Otros medios del grupo Editorial Prensa Ibérica

Diari de Girona | Diario de Ibiza | Diario de Mallorca | El Diari | Empordà | Faro de Vigo | Información | La Opinión de Granada | La Opinión de Málaga | La Opinión de Murcia | La Opinión de Tenerife | La Opinión de Zamora | La Provincia | La Nueva España | Levante-EMV | Mallorca Zeitung | Regió 7 | Superdeporte | The Adelaide Review | 97.7 La Radio | Blog Mis-Recetas | Euroresidentes | Lotería de Navidad

Aviso legal

	Vuelos Barcelona Palermo desde 58,92€ RESERVA AHORA	Vuelos Madrid Palermo desde 141,44€ RESERVA AHORA	Vuelos Barce desde 70 RESERVA
	<hr/>		

[Iniciar sesion en facebook](#) | [Iniciar sesión](#) | [Regístrate](#)

Holísticos
Investigadores españoles abren una nueva vía de diseño de fármacos
10:31h | EuropaPress

Investigadores del Instituto de Investigación Hospital del Mar (IMIM) y la Universitat Pompeu Fabra de Barcelona han conseguido reproducir y reconstruir el proceso completo de la unión de una molécula pequeña a su proteína diana, lo que abre una nueva vía en el diseño de nuevos fármacos.

[Sé el primero en comentar esta noticia]

0

[Share](#)

 [Compartir](#)



Investigadores del Instituto de Investigación Hospital del Mar (IMIM) y la Universitat Pompeu Fabra de Barcelona han conseguido reproducir y reconstruir el proceso completo de la unión de una molécula pequeña a su proteína diana, lo que abre una nueva vía en el diseño de nuevos fármacos.

BARCELONA, 7 (EUROPA PRESS)

Investigadores del Instituto de Investigación Hospital del Mar (IMIM) y la Universitat Pompeu Fabra de Barcelona han conseguido reproducir y reconstruir el proceso completo de la unión de una molécula pequeña a su proteína diana, lo que abre una nueva vía en el diseño de nuevos fármacos.

Este avance permite calcular la afinidad y el tiempo de unión del fármaco con la proteína y conocer qué interacciones establece el fármaco para actuar, permitiendo así avanzar hacia el diseño más seguro y eficiente de nuevos fármacos.

Este innovador trabajo ayuda a ver un proceso que hasta ahora era invisible, y se basa en la captura de movimientos de moléculas pequeñas con una resolución de hasta un átomo, más allá de las capacidades técnicas actuales.

Mediante técnicas informáticas es posible representar las moléculas en su escala atómica y reproducir sus movimientos con una alta precisión matemática.

La comprensión de cómo se produce la unión de una proteína y una molécula, esta última provocando una respuesta biológica al ser reconocida por la primera, es de vital importancia para el diseño de nuevos medicamentos.

A pesar del progreso de la técnica, hasta ahora, ningún estudio había proporcionado una reconstrucción completa del citado proceso.

"El método proporciona no sólo la afinidad de unión y la cinética de la reacción, sino también información de la resolución atómica durante el proceso: sitios de unión, estados de transición y estados metaestables", ha explicado el coordinador del Laboratorio de Biofísica Computacional del Programa de Investigación en Informática Biomédica del IMIM y la UPF, Gianni de Fabritiis.

El coordinador ha destacado que esta metodología es directamente aplicable a otros sistemas moleculares, y, por tanto, de interés general en la investigación biomédica y farmacéutica.

Temas relacionados

[SALUD](#) [HOLÍSTICOS](#) [HOSPITALES Y CLÍNICAS](#) [MEDICAMENTOS](#) [EMPRESAS](#) [UNIVERSIDAD POMPEU FABRA](#)

Información relacionada

[Investigadores españoles abren una nueva vía de diseño de fármacos](#)

0

Share



Destacamos



Todo sobre la Feria del Libro

En directo desde las casetas del Parque del Retiro.



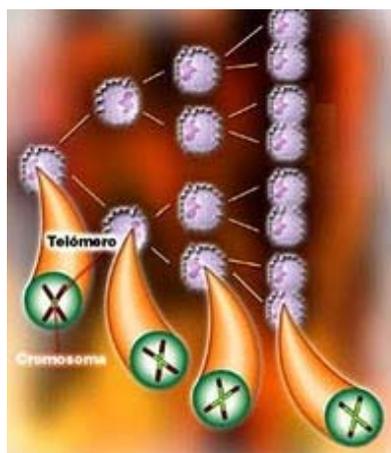
Comienza el baile de entrenadores

Así se están moviendo los banquillos de la Liga BBVA.

herenciageneticayenfermedad

Los avances de la medicina en el campo de la genética, por ende de la herencia, están modificando el paisaje del conocimiento médico de las enfermedades. Este BLOG intenta informar acerca de los avances proveyendo orientación al enfermo y su familia así como información científica al profesional del equipo de salud de habla hispana.

TELÓMEROS



la llave de las ciencias médicas en los próximos cien años

herencia genética y enfermedad

con la tecnología de Google™

AddThis



Archivo del blog

▼ 2011 (3332)

▼ junio (134)

Tras los pasos del virus de la hepatitis C - Diari...

El envejecimiento favorece la aparición de infecci...

Un proyecto europeo busca un sistema de rehabilita...

La exposición temprana a la luz afina el circuito ...

Analizar el cerebro mediante sistemas de comunicac...

Los hombres tienen más dificultad que las mujeres ...

Mostrando las entradas más recientes para la consulta
IMIM [Mostrar las entradas más antiguas](#)

lunes 6 de junio de 2011

Una simulación reproduce la unión de una molécula pequeña a su proteína diana - DiarioMedico.com

Diariomedico.com

ESPAÑA

DISEÑO DE FÁRMACOS

Una simulación reproduce la unión de una molécula pequeña a su proteína diana

Un grupo del Instituto de Investigación Hospital del Mar (IMIM) y la Universidad Pompeu Fabra (UPF), de Barcelona, ha conseguido reproducir y reconstruir un proceso completo de la unión de una molécula pequeña a su proteína diana. Este avance permite calcular la afinidad y el tiempo de unión del fármaco para la proteína y conocer qué interacciones establece el fármaco para actuar, permitiendo así avanzar hacia el diseño más seguro y eficiente de nuevos medicamentos.

Redacción - Martes, 7 de Junio de 2011 - Actualizado a las 00:00h.

El trabajo, que se publica en la versión electrónica de Proceedings of the National Academy of Sciences, ayuda a visualizar un proceso que hasta ahora era invisible y por lo tanto desconocido, abriendo una nueva vía en el diseño de nuevos medicamentos.

La unión de un medicamento, que por lo general suele ser una molécula pequeña, a su proteína diana es un proceso muy dinámico y depende de interacciones a escala nanométrica y pasa a escalas de tiempo del orden de nano/microsegundos. Además, la captura de los movimientos de las moléculas pequeñas con una resolución de hasta un átomo está más allá de las capacidades técnicas actuales. Sin embargo, mediante técnicas informáticas es posible representar las moléculas en su escala atómica y reproducir sus movimientos con una alta precisión matemática.

La comprensión de cómo se produce la unión de una proteína y una molécula, esta última provocando una respuesta biológica al ser reconocida por la primera, es de vital importancia para el diseño de nuevos medicamentos. A pesar del progreso de la técnica, hasta ahora ningún estudio había proporcionado una completa

Tres genes, ligados a mejoras en atrofia muscular ...

El 6% de los niños sufre déficit de atención - Dia...

Una simulación reproduce la unión de una molécula ...

El aumento de oxígeno tras la vitrectomía causa gl...

La innovación en prótesis mamarias está relacionad...

La terapia con estrógenos aumenta la densidad ósea...

El tabaquismo paterno adelanta la menopausia de la...

Descubren cuatro mutaciones genéticas que están en...

El 60 por ciento de los pacientes alérgicos podría...

Los pacientes con fibromialgia sufren más efectos ...

Más de seis millones de españoles presentan dolor ...

Las inyecciones intravítreas desplazan a la cirugía...

Un proyecto coparticipado por el CENIT estudiará l...

¿Hay que evaluar en bebés enfermedades que no se p...

Las lesiones en la cabeza podrían generar conducta...

Flexibilidad en ligamentos es común en la adolesce...

Las estatinas reducirían el riesgo de cáncer de pr...

Según los expertos, cepa mortal de E. Coli en Euro...

Se relacionan las salas de operaciones ruidosas co...

Más de 1 millón de estadounidenses viven con VIH s...

MiPlato es MyPlate: Los EE. UU. sirve las nuevas g...

Es posible que las dietas bajas en carbohidratos y...

Enfermedad mental relacionada con mayor riesgo de ...

Dos nuevas armas contra el melanoma | Cáncer | elm...

España secuenciada por primera vez el genoma de la l...

Se puede resucitar "con manos solas" - lanacion.co...

IntraMed - Noticias médicas - La moda que disparó ...

ANAFILAXIA || IntraMed - Artículos - Anafilaxia

Profilaxis antibiótica || IntraMed - Artículos - P...

IntraMed - Noticias médicas - La venganza de los g...

VIH/sida: 30 años de una lucha en curso - lanacion...

Negación e inacción - lanacion.com

La alta miopía amenaza la retina del 40% de los pa...

Hojas Informativas Acerca de la Inocuidad Alimenta...

Seguridad con los alimentos: MedlinePlus en español...

reconstrucción de un proceso de unión proteína-ligando. "El método proporciona no sólo la afinidad de unión y la cinética de la reacción, sino también información de la resolución atómica durante el proceso: sitios de unión, estados de transición y estados metaestables son potencialmente útiles para ampliar la probabilidad de éxito en el diseño de fármacos. Esta metodología es directamente aplicable a otros sistemas moleculares, y por tanto de interés general en la investigación biomédica y farmacéutica", ha explicado Gianni de Fabritiis, coordinador del Laboratorio de Biofísica Computacional del Programa de Investigación en Informática Biomédica, en el IMIM y la UPF.

Los científicos trabajan ahora para ampliar la aplicación de esta metodología y así aprovechar mejor las capacidades de la computación, ya que en los casos en que los ligandos son más grandes y flexibles y donde las proteínas presentan los procesos de unión más compleja se requiere todavía un mayor esfuerzo computacional. Un grupo del Instituto de Investigación Hospital del Mar (IMIM) y la Universidad Pompeu Fabra (UPF), de Barcelona, ha conseguido reproducir y reconstruir un proceso completo de la unión de una molécula pequeña a su proteína diana. Este avance permite calcular la afinidad y el tiempo de unión del fármaco con la proteína y conocer qué interacciones establece el fármaco para actuar, permitiendo así avanzar hacia el diseño más seguro y eficiente de nuevos medicamentos.

El trabajo, que se publica en la versión electrónica de Proceedings of the National Academy of Sciences, ayuda a visualizar un proceso que hasta ahora era invisible y por lo tanto desconocido, abriendo una nueva vía en el diseño de nuevos medicamentos.

La unión de un medicamento, que por lo general suele ser una molécula pequeña, a su proteína diana es un proceso muy dinámico y depende de interacciones a escala nanométrica y pasa a escalas de tiempo del orden de nano/microsegundos. Además, la captura de los movimientos de las moléculas pequeñas con una resolución de hasta un átomo está más allá de las capacidades técnicas actuales. Sin embargo, mediante técnicas informáticas es posible representar las moléculas en su escala atómica y reproducir sus movimientos con una alta precisión matemática.

La comprensión de cómo se produce la unión de una proteína y una molécula, esta última provocando una respuesta biológica al ser reconocida por la primera, es de vital importancia para el diseño de nuevos medicamentos. A pesar del progreso de la técnica, hasta ahora ningún estudio había proporcionado una completa reconstrucción de un proceso de unión proteína-ligando. "El método proporciona no sólo la afinidad de unión y la cinética de la reacción, sino también información de la resolución atómica durante el proceso: sitios de unión, estados de transición y estados metaestables son potencialmente útiles para ampliar la probabilidad de éxito en el diseño de fármacos. Esta metodología es directamente aplicable a otros sistemas moleculares, y por tanto de interés general en la investigación biomédica y farmacéutica", ha explicado Gianni de Fabritiis, coordinador del Laboratorio de Biofísica Computacional del Programa de Investigación en Informática Biomédica, en el IMIM y la UPF.

Los científicos trabajan ahora para ampliar la aplicación de esta metodología y así aprovechar mejor las capacidades de la computación, ya que en los casos en que los ligandos son más grandes y flexibles y donde las proteínas presentan los procesos de unión más compleja se requiere todavía un mayor esfuerzo computacional. [Una simulación reproduce la unión de una molécula pequeña a su proteína diana - DiarioMedico.com](http://www.diariomedico.com)

Regístrate Usuario: Contraseña: Recuérdame  Avanzado

[Portada](#)
[Nacional](#)
[Internacional](#)
[Economía](#)
[Deportes](#)
[Ocio y Cultura](#)
[Sociedad](#)
[Ciencia y Tecnología](#)
[Salud](#)
[Gente](#)
[Medios](#)
[Miembros](#)

Investigadores españoles abren una nueva vía de diseño de fármacos

10:31 (7-06-11) Medio: [Europa press](#) Categoría: [Salud](#)

BARCELONA, 7 Jun. (EUROPA PRESS) - Investigadores del Instituto de Investigación Hospital del Mar (IMIM) y la Universitat Pompeu Fabra de Barcelona han conseguido reproducir y reconstruir el proceso completo de la unión de una molécula pequeña a su proteína diana, lo que abre una nueva vía en el diseño de nuevos fármacos.

[Leer noticia...](#)

0 Por GLOVOZ
Votar 0 Comentarios | 0

europapress.es

GLOVOZ ofrece las últimas **noticias** de los principales medios y las enviadas por nuestros usuarios. Infórmese con el **resumen de prensa** que ofrece **GLOVOZ**.

Actualmente hay disponibles **1.294.399** noticias, de las cuales **2.792** han sido publicadas en las últimas 24 horas.

Síguenos en:

A 20 personas les gusta esto. Sé el primero de tus amigos.



www.afectadosrumasa.com

¿Es usted un afectado de Nueva Rumasa?



Línea telefónica exclusiva
956 785 254
Lláme ahora sin compromiso

Comentario*:

*Campos Obligatorios

Nick*:

Será Visible

Email*:

No será visible

► [Leer Condiciones Generales y política de privacidad / Abrir en otra ventana](#)

He leído y Acepto las Condiciones Generales y el tratamiento de Datos Personales*

Normas de Uso

GLOVOZ no se responsabiliza de las opiniones vertidas y se reserva el derecho de eliminar los mensajes considerados contrarios a la legislación vigente, de contenido ofensivo o discriminatorio o cualquiera que pueda atentar contra los derechos de terceros.

Registro

Desea comentar de forma rápida sin tener que confirmar su email en cada comentario, además poder incluir su avatar y acceder a servicios de suscripción reservados únicamente a usuarios registrados... [Regístrese](#)

4,15% TAE de Rentabilidad

Depósito al 4,15% TAE a 12 meses. Disponibilidad al 6º mes al 3,60% www.oficinadirecta.com/Deposito

Spa desde 9€, cena 5.95€

Hoy te ofrecemos planes exclusivos No los dejes escapar.Regístrate ya Letsbonus.com

Adios malos olores

Nuevo Philips GoPure para tu coche Elimina el 99% de las partículas www.gopure.es

Cuenta iBanesto 3,60% TAE

3,60% TAE. Sin gastos ni comisiones iHaz cuentas y verás que ganas más! www.ibanestocuentaazul.com

Anuncios Google

Noticias más votadas

López y secretarios provinciales muestran su "denuncia profunda" al Plan de Carreteras que "hipoteca" CyL hasta 2020

18:30 (6-04-09) Medio: [Europa press](#) Categoría: [Nacional](#)
VALLADOLID, 6 Abr. (EUROPA PRESS) - El secretario autonómico del PSOE, Óscar López, y los nueve secretarios provinciales del PSCyL manifestaron hoy [Leer noticia...](#)

2 Por GLOVOZ
Votar 0 Comentarios |

europapress.es

El Gobierno lanza una campaña publicitaria para frenar la maniobra mediática de los 'camisas rojas'

06:55 (21-04-09) Medio: [ADN](#) Categoría: [Internacional](#)
"La guerra de los medios tiene como objetivo frenar la campaña de los 'camisas rojas' y explicar la verdadera situación a la comunidad internacional", indicó [Leer noticia...](#)

2 Por GLOVOZ
Votar 0 Comentarios | 24

adn.es

Taguas niega mayor: rechaza cambiar el modelo económico y pide encarecer el despido

15:17 (21-04-09) Medio: [Libertad Digital](#) Categoría: [Economía](#)

El presidente de la patronal de las grandes constructoras ex director de la Oficina Económica de Moncloa, David Taguas, contradice todos los análisis serios, contra [Leer noticia...](#)

2 Por GLOVOZ
Votar 0 Comentarios |

Libertad Digital

Larumbe Danza organiza una jornada de puertas abiertas el 29

de abril. Día Internacional de la Danza

11:55 (21-04-09) Medio: ADN Categoría: Ocio y Cultura
 La Asociación de la Comunidad de Cultura de España abre las puertas de su sede en el Centro Cultural Leer noticia...

2 Por GLOVOZ **adn.es**
 Votar 0 Comentarios | 3

Tiempo utilizado en la carga: 1.142 segundos

Noticias más visitadas

Muere el ginecólogo José Javier Salvà al precipitarse desde su casa

10:24 (24-08-09) Medio: El Mundo Categoría: Nacional
 El prestigioso médico murió ayer domingo al caer desde el quinto piso donde vivía. La investigación no descarta ninguna hipótesis. Leer Leer noticia...

3 Por GLOVOZ **ELOMUNDO.es**
 Votar 1238 9 Comentarios |

Fallecen dos conductores en el acto tras sendos accidentes ocurridos en las últimas horas en la región

11:26 (10-04-09) Medio: ADN Categoría: Nacional
 El conductor de un vehículo ha fallecido en el acto esta mañana y un motorista ayer al atardecer en sendos accidentes de tráfico ocurridos en Leer noticia...

49 Por GLOVOZ **adn.es**
 Votar 0 Comentarios | 787

Ruiz Mateos se ofrece a gestionar y reflotar Caja Castilla La Mancha

20:38 (21-04-09) Medio: Libertad Digital Categoría: Economía
 En octubre de 2007 ya capitaneó un grupo de inversores interesados en adquirir Northern Rock para reflotar la entidad. Ahora, Nueva Rumasa ha mostrado su Leer noticia...

87 Por GLOVOZ **Libertad Digital**
 Votar 399 1 Comentarios |

Abel Matutes Prats y Linda Scaperotto celebran una boda de cuento de hadas en Ibiza

19:09 (5-07-09) Medio: Hola Categoría: Gente - Celebrities
 Sin duda, ha sido una de las bodas del año. Abel Matutes Prats, hijo del ex Ministro de Asuntos Exteriores, contrajo matrimonio ayer con la Leer noticia...

3 Por GLOVOZ **hola.com**
 Votar 0 Comentarios | 374

Investigadores españoles abren una nueva vía de diseño de fármacos



Investigadores del Instituto de Investigación Hospital del Mar (IMIM) y la Universitat Pompeu Fabra de Barcelona han conseguido reproducir y reconstruir el proceso completo de la unión de una molécula pequeña a su proteína diana, lo que abre una nueva vía en el diseño de nuevos fármacos.

Este avance permite calcular la afinidad y el tiempo de unión del fármaco con la proteína y conocer qué interacciones establece el fármaco para actuar, permitiendo así avanzar hacia el diseño más seguro y eficiente de nuevos fármacos.

Este innovador trabajo ayuda a ver un proceso que hasta ahora era invisible, y se basa en la captura de movimientos de moléculas pequeñas con una

resolución de hasta un átomo, más allá de las capacidades técnicas actuales.

Mediante técnicas informáticas es posible representar las moléculas en su escala atómica y reproducir sus movimientos con una alta precisión matemática.

La comprensión de cómo se produce la unión de una proteína y una molécula, esta última provocando una respuesta biológica al ser reconocida por la primera, es de vital importancia para el diseño de nuevos medicamentos.

A pesar del progreso de la técnica, hasta ahora, ningún estudio había proporcionado una reconstrucción completa del citado proceso.

"El método proporciona no sólo la afinidad de unión y la cinética de la reacción, sino también información de la resolución atómica durante el proceso: sitios de unión, estados de transición y estados metaestables", ha explicado el coordinador del Laboratorio de Biofísica Computacional del Programa de Investigación en Informática Biomédica del IMIM y la UPF, Gianni de Fabritiis.

El coordinador ha destacado que esta metodología es directamente aplicable a otros sistemas moleculares, y, por tanto, de interés general en la investigación biomédica y farmacéutica.

PUBLICIDAD



Sorteamos **gratis** todos los días
1.000.000€

supersorteo.com

Anúnciate con nosotros

Ftv

miércoles, 08 de junio de 2011

Mundo	España	Canarias	Fuerteventura	Puerto	La Oliva	Pájara	Antigua	Tuineje	Betancuría
Sociedad	Cultura	Sucesos	Deportes	Hemeroteca	Opinión - Blogs	Topsecret: en voz baja			
ÚLTIMA HORA	14:42 h. La Consejería canaria de Sanidad estudia un supuesto caso de E.Coli en una ciudadana alemana					BUSCAR			

Sociedad / 7/06/2011 (09:31 h.)

Investigadores españoles abren una nueva vía de diseño de fármacos

Compartir:     

BARCELONA, 7 (EUROPA PRESS)

Investigadores del Instituto de Investigación Hospital del Mar (IMIM) y la Universitat Pompeu Fabra de Barcelona han conseguido reproducir y reconstruir el proceso completo de la unión de una molécula pequeña a su proteína diana, lo que abre una nueva vía en el diseño de nuevos fármacos.

Este avance permite calcular la afinidad y el tiempo de unión del fármaco con la proteína y conocer qué interacciones establece el fármaco para actuar, permitiendo así avanzar hacia el diseño más seguro y eficiente de nuevos fármacos.

Este innovador trabajo ayuda a ver un proceso que hasta ahora era invisible, y se basa en la captura de movimientos de moléculas pequeñas con una resolución de hasta un átomo, más allá de las capacidades técnicas actuales.

Mediante técnicas informáticas es posible representar las moléculas en su escala atómica y reproducir sus movimientos con una alta precisión matemática.

La comprensión de cómo se produce la unión de una proteína y una molécula, esta última provocando una respuesta biológica al ser reconocida por la primera, es de vital importancia para el diseño de nuevos medicamentos.

A pesar del progreso de la técnica, hasta ahora, ningún estudio había proporcionado una reconstrucción completa del citado proceso.

"El método proporciona no sólo la afinidad de unión y la cinética de la reacción, sino también información de la resolución atómica durante el proceso: sitios de unión, estados de transición y estados metaestables", ha explicado el coordinador del Laboratorio de Biofísica Computacional del Programa de Investigación en Informática Biomédica del IMIM y la UPF, Gianni de Fabritiis.

El coordinador ha destacado que esta metodología es directamente aplicable a otros sistemas moleculares, y, por tanto, de interés general en la investigación biomédica y farmacéutica.

Envíenos su opinión sobre la noticia.

Nombre: (Opcional)

Asunto: (Opcional)

Texto: (solo se permite escribir 1200 caracteres.) Le quedan: 1200

PUBLICIDAD



Canarias

- « Barragán (CC): "El pacto regional ...
- « Más de 28.000 familias perderán su ...
- « Los Cabildos de Tenerife y Gran Can...
- « Soria afirma que ya está negociando...
- « Nuevo encuentro entre CC y PSC para...
- « CC y PSC cierran empleo, cohesión s...

Fuerteventura

- « CC y PSC presentarán su acuerdo de ...
- « 9.000 familias de Fuerteventura pod...
- « El aeropuerto contará con un radar...
- « Cruz Roja distribuirá en Fuertevent...
- « Las directivas de CC y el PSC en la...
- « Sistemas anticolidión para evitar l...

Mundo

- « Los médicos examinan a Dominique St...
- « Berlusconi pagó 280.000 euros en co...
- « Detectados niveles de radiactividad...
- « Gadafi y Zuma acuerdan un alto el f...
- « Un hijo de Gadafi muere en un bomba...
- « Humala formará un "gobierno de con...

España

- « Canarias, segunda región en candida...
- « Un guardia incita a la violencia co...
- « El paro baja en mayo en 79.701 pers...
- « Cada barrio de Madrid tendrá un por...
- « Acciona logra contratos de construc...
- « Hasta 5.000 millones para avalar el...

Deportes

- « Un majorero subcampeón de SUP del m...



Investigadores españoles abren una nueva vía para el diseño de fármacos

E. P. ■ Barcelona

Investigadores del Instituto de Investigación Hospital del Mar (IMIM) y la Universitat Pompeu Fabra de Barcelona han conseguido reproducir y reconstruir el proceso completo de la unión de una molécula pequeña a su proteína diana, lo que abre una nueva vía en el diseño de nuevos fármacos.

Este avance permite calcular la afinidad y el tiempo de unión del fármaco con la proteína y conocer qué interacciones establece para actuar, permitiendo así avanzar hacia el diseño más seguro y eficiente de nuevos fárma-

cos. Este innovador trabajo ayuda a ver un proceso que hasta ahora era invisible, y se basa en la captura de movimientos de moléculas pequeñas con una resolución de hasta un átomo, más allá de las capacidades técnicas actuales.

Mediante técnicas informáticas es posible representar las moléculas en su escala atómica y reproducir sus movimientos con una alta precisión matemática. La comprensión de cómo se produce la unión de una proteína y una molécula, esta última provocando una respuesta biológica al ser reconocida por la primera, es de vital importancia para el diseño de nuevos medicamentos.

Miercoles 8 junio, 2011

PORTADA

NOTICIAS

EMPLEO

AGENDA

FORMACIÓN

FARMATECA

CONÓCENOS

Utilidades farmaco21:

Herramientas

Recursos

Links

Directorio de Empresas

Anúnciate

Buscador de noticias

GO!

LABORATORIOS FARMACEUTICOS

Noticias de INVESTIGACION

Investigadores españoles abren una nueva vía de diseño de fármacos

Del IMIM y la Universitat Pompeu Fabra


 europa press

Me gusta

2

Tweet



08/06/2011

Investigadores del Instituto de Investigación Hospital del Mar (IMIM) y la Universitat Pompeu Fabra de Barcelona han conseguido reproducir y reconstruir el proceso completo de la unión de una molécula pequeña a su proteína diana, lo que abre una nueva vía en el diseño de nuevos fármacos.

Este avance permite calcular la afinidad y el tiempo de unión del fármaco con la proteína y conocer qué interacciones establece el fármaco para actuar, permitiendo así avanzar hacia el diseño más seguro y eficiente de nuevos fármacos.

Este innovador trabajo ayuda a ver un proceso que hasta ahora era invisible, y se basa en la captura de movimientos de moléculas pequeñas con una resolución de hasta un átomo, más allá de las capacidades técnicas actuales.

Mediante técnicas informáticas es posible representar las moléculas en su escala atómica y reproducir sus movimientos con una alta precisión matemática.

La comprensión de cómo se produce la unión de una proteína y una molécula, esta última provocando una respuesta biológica al ser reconocida por la primera, es de vital importancia para el diseño de nuevos medicamentos.

A pesar del progreso de la técnica, hasta ahora, ningún estudio había proporcionado una reconstrucción completa del citado proceso.

El método proporciona no sólo la afinidad de unión y la cinética de la reacción, sino también información de la resolución atómica durante el proceso: sitios de unión, estados de transición y estados metaestables. ha explicado el coordinador del Laboratorio de Biofísica Computacional del Programa de Investigación en Informática Biomédica del IMIM y la UPF, Gianni de Fabritiis.

El coordinador ha destacado que esta metodología es directamente aplicable a otros sistemas moleculares, y, por tanto, de interés general en la investigación biomédica y farmacéutica

Colaborador Farmaco21



DANTEX GROUP

Dantex Group, con oficinas en Barcelona y Madrid, es un conjunto de empresas especializadas en la planificación, asesoría y desarrollo de proyectos de Marketing y Comunicación mediante las más avanzadas técnicas de Comunicación Digital

www.dantexgroup.com/


TU EMPRESA EN ESTE BANNER



Anúnciate

Contacto

Aviso legal

Búscanos en Facebook

facebook



www.farmaco21.com

Me gusta

www.farmaco21.com publicaron:



Investigadores españoles abren una nueva vía de diseño de fármacos

www.farmaco21.com
Investigadores del Instituto de Investigación Hospital del Mar (IMIM) y la Universitat Pompeu Fabra de Barcelona han conseguido reproducir y reconstruir el proceso completo de la unión de una molécula pequeña a su proteína diana, lo que abre una nueva vía en el diseño

A 1,739 personas les gusta

www.farmaco21.com.



Plug-in social de Facebook



FARMA Y SALUD

La salud es un derecho humano fundamental, reconocido como tal por la Constitución Nacional de 1994 y los Tratados Internacionales por ella incorporados, con jerarquía constitucional. Este Blog intenta mantenerte informado acerca de las novedades legislativas, doctrinarias y jurisprudenciales relacionadas con el Derecho de la Salud y todos sus actores

MIÉRCOLES 8 DE JUNIO DE 2011

INVESTIGADORES ESPAÑOLES ABREN UNA NUEVA VÍA DE DISEÑO DE FÁRMACOS

BARCELONA, 7 Jun. (EUROPA PRESS) -

Investigadores del Instituto de Investigación Hospital del Mar (IMIM) y la Universitat Pompeu Fabra de Barcelona han conseguido reproducir y reconstruir el proceso completo de la unión de una molécula pequeña a su proteína diana, lo que abre una nueva vía en el diseño de nuevos fármacos.

Este avance permite calcular la afinidad y el tiempo de unión del fármaco con la proteína y conocer qué interacciones establece el fármaco para actuar, permitiendo así avanzar hacia el diseño más seguro y eficiente de nuevos fármacos.

Este innovador trabajo ayuda a ver un proceso que hasta ahora era invisible, y se basa en la captura de movimientos de moléculas pequeñas con una resolución de hasta un átomo, más allá de las capacidades técnicas actuales.

Mediante técnicas informáticas es posible representar las moléculas en su escala atómica y reproducir sus movimientos con una alta precisión matemática.

La comprensión de cómo se produce la unión de una proteína y una molécula, esta última provocando una respuesta biológica al ser reconocida por la primera, es de vital importancia para el diseño de nuevos medicamentos.

A pesar del progreso de la técnica, hasta ahora, ningún estudio había proporcionado una reconstrucción completa del citado proceso.

"El método proporciona no sólo la afinidad de unión y la cinética de la reacción, sino también información de la resolución atómica durante el proceso: sitios de unión, estados de transición y estados metaestables", ha explicado el coordinador del Laboratorio de Biofísica Computacional del Programa de Investigación en Informática Biomédica del IMIM y la UPF, Gianni de Fabritiis.

El coordinador ha destacado que esta metodología es directamente aplicable a otros sistemas moleculares, y, por tanto, de interés general en la investigación biomédica y farmacéutica.

Publicado por [Maria Cristina Cortesi](#) en 09:57

Etiquetas: [noticias sobre medicamentos](#)

0 comentarios:

PÁGINAS

[Página principal](#)

[MI CV](#)

[ACCEDE A LAS DROGAS APROBADAS POR FDA C DIA](#)

[ACCEDE A BUSCADOR I PATENTES](#)

[LIBROS VERDES DE LA MATERIA DE SALUD](#)

[BUSCA INFORMACIÓN T SOBRE MEDICAMENTOS OTR...](#)

[ACCEDE A LA GUIA INTERNACIONAL DE INDICADORES DE P...](#)

[INFORMACIÓN SOBRE C CONGRESOS, TALLERES](#)

[LISTADO DE LABORATO EN ARGENTINA](#)

CONSULTORIA INTEGRAL EN DE LA SALUD



accede a www.aizenbercortesi.com.ar

MI PERFIL



Maria Cristir Cortesi

DRA. MARÍA CRISTINA CO
Abogada espe

en Derecho Médico y Regulación Jurídica del Medicamento. Vicepresic la Comisión de Derecho Sanitario de la Asociació

Salud

Del IMIM y la Universitat Pompeu Fabra

Investigadores españoles abren una nueva vía de diseño de fármacos

Directorio

- Oftalmología
- grupo de investigación
- investigación biomédica
- Biología Molecular



Foto: VORTAL

BARCELONA, 7 Jun. (EUROPA PRESS) -

Investigadores del Instituto de Investigación Hospital del Mar (IMIM) y la Universitat Pompeu Fabra de Barcelona han conseguido reproducir y reconstruir el proceso completo de la unión de una molécula pequeña a su proteína diana, lo que abre una nueva vía en el diseño de nuevos fármacos.

Este avance permite calcular la afinidad y el tiempo de unión del fármaco con la proteína y conocer qué interacciones establece el fármaco para actuar, permitiendo así avanzar hacia el diseño más seguro y eficiente de nuevos fármacos.

Este innovador trabajo ayuda a ver un proceso que hasta ahora era invisible, y se basa en la captura de movimientos de moléculas pequeñas con una resolución de hasta un átomo, más allá de las capacidades técnicas actuales.

Mediante técnicas informáticas es posible representar las moléculas en su escala atómica y reproducir sus movimientos con una alta precisión matemática.

La comprensión de cómo se produce la unión de una proteína y una molécula, esta última provocando una respuesta biológica al ser reconocida por la primera, es de vital importancia para el diseño de nuevos medicamentos.

A pesar del progreso de la técnica, hasta ahora, ningún estudio había proporcionado una reconstrucción completa del citado proceso.

"El método proporciona no sólo la afinidad de unión y la cinética de la reacción, sino también información de la resolución atómica durante el proceso: sitios de unión, estados de transición y estados metaestables", ha explicado el coordinador del Laboratorio de Biofísica Computacional del Programa de Investigación en Informática Biomédica del IMIM y la UPF, Gianni de Fabritiis.

El coordinador ha destacado que esta metodología es directamente aplicable a otros sistemas moleculares, y, por tanto, de interés general en la investigación biomédica y farmacéutica.

© 2011 Europa Press. Está expresamente prohibida la redistribución y la redifusión de todo o parte de los servicios de Europa Press sin su previo y expreso consentimiento.



**el semanal
digital.com**

Periódico permanente en Internet
Más de 1.500.000 lectores
07-06-2011. Actualizado 13:33

INICIO ESPAÑA MUNDO ECONOMÍA MEDIOS DEPORTES CHISMÓGRAFO MOTOR LIBROS OCIO BLOGS SERVICIOS FORMACIÓN SEGUROS CASAS

Novedades | Pruebas | Motos | Híbrido/Ecológico | SUV/4x4 | Archivo | Tráfico | Seguros

Buscar en esd en Google

INICIO -- ÚLTIMA HORA

Del IMIM y la Universitat Pompeu Fabra

Investigadores españoles abren una nueva vía de diseño de fármacos

El Semanal Digital

Investigadores del Instituto de Investigación Hospital del Mar (IMIM) y la Universitat Pompeu Fabra de Barcelona han conseguido reproducir y reconstruir el proceso completo de la unión de una molécula pequeña a su proteína diana, lo que abre una nueva vía en el diseño de nuevos fármacos.

7 de junio de 2011

Compartir:

Investigadores del Instituto de Investigación Hospital del Mar (IMIM) y la Universitat Pompeu Fabra de Barcelona han conseguido reproducir y reconstruir el proceso completo de la unión de una molécula pequeña a su proteína diana, lo que abre una nueva vía en el diseño de nuevos fármacos.

Este avance permite calcular la afinidad y el tiempo de unión del fármaco con la proteína y conocer qué interacciones establece el fármaco para actuar, permitiendo así avanzar hacia el diseño más seguro y eficiente de nuevos fármacos.

Este innovador trabajo ayuda a ver un proceso que hasta ahora era invisible, y se basa en la captura de movimientos de moléculas pequeñas con una resolución de hasta un átomo, más allá de las capacidades técnicas actuales.

Mediante técnicas informáticas es posible representar las moléculas en su escala atómica y reproducir sus movimientos con una alta precisión matemática.

La comprensión de cómo se produce la unión de una proteína y una molécula, esta última provocando una respuesta biológica al ser reconocida por la primera, es de vital importancia para el diseño de nuevos medicamentos.

A pesar del progreso de la técnica, hasta ahora, ningún estudio había proporcionado una reconstrucción completa del citado proceso.

"El método proporciona no sólo la afinidad de unión y la cinética de la reacción, sino también información de la resolución atómica durante el proceso: sitios de unión, estados de transición y estados metaestables", ha explicado el coordinador del Laboratorio de Biofísica Computacional del Programa de Investigación en Informática Biomédica del IMIM y la UPF, Gianni de Fabritiis.

El coordinador ha destacado que esta metodología es directamente aplicable a otros sistemas moleculares, y, por tanto, de interés general en la investigación biomédica y farmacéutica.

[IR ARRIBA](#)

¿Te ha gustado este artículo? Coméntaselo a tus amigos y conocidos:



M'agrada

Sigues el primer dels teus amics a qui li agrada.



Pastillas, pildoras, fármacos

PUBLICIDAD

GUÍAS LOCALES

Andalucía
Aragón
Asturias
Balears
Cantabria
Castilla La Mancha
Castilla y León

PUBLICIDAD



[Siguenos en Facebook](#) [Siguenos en Twitter](#)

ÚLTIMA HORA

+ TITULARES

[España](#) [Mundo](#) [Economía](#) [Medios](#)

- 13:02** Moody's sitúa el 'rating' de Portugal Telecom al borde del bono basura
- 12:58** ¿Lanzó Reese Witherspoon una indirecta a Blake Lively?
- 12:45** Damm muestra su interés por Cacaolat
- 12:44** La FAO advierte del continuo aumento de los precios de los alimentos
- 12:44** Atacadas las sedes de la Guardia Popular y la Guardia Revolucionaria
- 12:41** Acerinox presenta un ERE de seis meses para el 74% de su plantilla en Cádiz
- 12:39** El Gobierno jordano se dispone a amnistiar a 8.000 presos

LO MÁS VISTO

+ TITULARES

- 1.** Telecinco se prepara para dar el "Belenazo" con un programa de armas tomar
- 2.** La elegida por Rajoy quiso explicarle a Cascos qué es el PP
- 3.** Chayo Mohedano desata la tormenta con un grave comentario sobre Ortega
- 4.** María Antonia Iglesias da un giro radical tras sus duras críticas al PSOE
- 5.** Pippa seduce hasta "sudando" y la nueva "chabolita" de los Príncipes
- 6.** El PP pone nombre y apellidos al paradigma del oscurantismo del Gobierno Barreda
- 7.** Temen que Ortega Cano cometa "una locura" cuando se despierte
- 8.** Los atractivos actores de Antena 3 esperan su primer hijo juntos
- 9.** Todos los detalles de la romántica boda de Irene Villa con el extenista
- 10.** Las confesiones transexuales de Kiko, fiesta playera y dos expulsados

PUBLICIDAD

0

tweets

tweet



Investigadores del Instituto de Investigación Hospital del Mar (IMIM) y la Universitat Pompeu Fabra de Barcelona han conseguido reproducir y reconstruir el proceso completo de la unión de una molécula pequeña a su proteína diana, lo que abre una nueva vía en el diseño de nuevos fármacos.

BARCELONA, 7 (EUROPA PRESS)

Este avance permite calcular la afinidad y el tiempo de unión del fármaco con la proteína y conocer qué interacciones establece el fármaco para actuar, permitiendo así avanzar hacia el diseño más seguro y eficiente de nuevos fármacos.

Este innovador trabajo ayuda a ver un proceso que hasta ahora era invisible, y se basa en la captura de movimientos de moléculas pequeñas con una resolución de hasta un átomo, más allá de las capacidades técnicas actuales.

Mediante técnicas informáticas es posible representar las moléculas en su escala atómica y reproducir sus movimientos con una alta precisión matemática.

La comprensión de cómo se produce la unión de una proteína y una molécula, esta última provocando una respuesta biológica al ser reconocida por la primera, es de vital importancia para el diseño de nuevos medicamentos.

A pesar del progreso de la técnica, hasta ahora, ningún estudio había proporcionado una reconstrucción completa del citado proceso.

"El método proporciona no sólo la afinidad de unión y la cinética de la reacción, sino también información de la resolución atómica durante el proceso: sitios de unión, estados de transición y estados metaestables", ha explicado el coordinador del Laboratorio de Biofísica Computacional del Programa de Investigación en Informática Biomédica del IMIM y la UPF, Gianni de Fabritiis.

El coordinador ha destacado que esta metodología es directamente aplicable a otros sistemas moleculares, y, por tanto, de interés general en la investigación biomédica y farmacéutica.

Publicidad



Empleos para Directivos



Pon tu CV en la base de datos que todos los headhunters usan.

[Más información »](#)

Curso de Diseño Web



Aprende a diseñar y maquetar webs a distancia. ¡Te regalamos la Licencia de Flash!

[Más información »](#)

Trading simple para todos



Sin experiencia previa, podría generar un ingreso extra mayor a su ingreso fijo mensual. ¡Regístrese ahora!

[Más información »](#)

Solidarios.	Asociaciones en las islas.	Números de interes.	Colabora con nosotros.	RSS	Email	Twitter	Facebook	<input type="text" value="Buscar noticias..."/>
-------------	----------------------------	---------------------	------------------------	-----	-------	---------	----------	---

PORTADA	LOCAL.	NACIONAL.	INTERNACIONAL.	DEPORTES.	SOCIEDAD.	CULTURA	EXTRA EDB.	TRIBUNA LIBRE.	DESCUBRE BALEARES.
----------------	--------	-----------	----------------	-----------	-----------	---------	------------	----------------	--------------------

ESTÁS AQUÍ: [PORTADA](#) [SOCIEDAD](#) [SALUD](#) [INVESTIGADORES ESPAÑOLES ABREN UNA NUEVA VÍA DE DISEÑO DE FÁRMACOS](#) JUNIO 8, 2011 3:16 PM

Investigadores españoles abren una nueva vía de diseño de fármacos

Escrito por Eldigitaldebaleares. el junio 7, 2011 en Salud | 0 Comentarios



Investigadores del Instituto de Investigación Hospital del Mar (IMIM) y la Universitat Pompeu Fabra de Barcelona han conseguido reproducir y reconstruir el proceso completo de la unión de una molécula pequeña a su proteína diana, lo que abre una nueva vía en el diseño de nuevos fármacos.

Este avance permite calcular la afinidad y el tiempo de unión del fármaco con la proteína y conocer qué interacciones establece el fármaco para actuar, permitiendo así avanzar hacia el diseño más seguro y eficiente de nuevos fármacos.

Este innovador trabajo ayuda a ver un proceso que hasta ahora era invisible, y se basa en la captura de movimientos de moléculas pequeñas con una

resolución de hasta un átomo, más allá de las capacidades técnicas actuales.

Mediante técnicas informáticas es posible representar las moléculas en su escala atómica y reproducir sus movimientos con una alta precisión matemática.

La comprensión de cómo se produce la unión de una proteína y una molécula, esta última provocando una respuesta biológica al ser reconocida por la primera, es de vital importancia para el diseño de nuevos medicamentos.

A pesar del progreso de la técnica, hasta ahora, ningún estudio había proporcionado una reconstrucción completa del citado proceso.

“El método proporciona no sólo la afinidad de unión y la cinética de la reacción, sino también información de la resolución atómica durante el proceso: sitios de unión, estados de transición y estados metaestables”, ha explicado el coordinador del Laboratorio de Biofísica Computacional del Programa de Investigación en Informática Biomédica del IMIM y la UPF, Gianni de Fabritiis.

El coordinador ha destacado que esta metodología es directamente aplicable a otros sistemas moleculares, y, por tanto, de interés general en la investigación biomédica y farmacéutica.

[Recomendar](#)

0

COMENTAR

Tu dirección de correo electrónico no será publicada. Los campos necesarios están marcados *

Nombre

Email

Web

Comentario

ÚLTIMAS NOTICIAS

[Los 'indignados' levantarán la Acampada en Sol el domingo](#)
JUNIO 8, 2011

[Intereconomía pide dinero a sus espectadores.](#)
JUNIO 8, 2011

[España vence a Venezuela, y cierra su gira americana.](#)
JUNIO 8, 2011

[Bernanke se confiesa optimista sobre el futuro de la economía](#)
JUNIO 8, 2011

[Fallece Jorge Semprún.](#)
JUNIO 8, 2011

PUBLICIDAD

LO MÁS VISITADO.

[HISTORICO : Nadal conquista su sexto Roland Garros.](#)
- 105 visitas

[Isern y su equipo, preparados para el trabajo.](#) - 90 visitas

[Los ciudadanos de Baleares deberán ahorrar más de 86.000 euros para mantener el nivel de vida al jub...](#) - 89 visitas

[Tamara Gorro, nueva concursante de 'Supervivientes 2011'](#) - 87 visitas

[Detenido en Manacor \(Mallorca\) un trabajador tras apuñalar en el cuello al encargado de obra](#) - 67 visitas

[El área pediátrica de Son Espases tiene capacidad para unas 150 camas, cerca de medio centenar más q...](#) - 53 visitas

[AÑO 92.. UN AÑO MAGICO.. ¿RECUERDAS A COBI?.](#)
- 50 visitas

[Bildu: "Lo más razonable" es gobernar en minoría en Guipúzcoa](#) - 43 visitas

[España cierra el año al frente del ranking de la FIFA por](#)

Divulgación Médica y de Salud

Noticias médicas, sanitarias y de salud en español, como exponentes del avance científico en el diagnóstico, tratamiento y curación, seleccionadas para el público en general por periodistas profesionales universitarios

HORA PENINSULAR
ESPAÑOLA

MARTES 7 DE JUNIO DE 2011

ORGANIZACIÓN
MUNDIAL DE LA
SALUD



MADRID



ENLACES PROPIOS

e-Línea
Economía Avanzada
Madrid Confidencial
Periodismo para
periodistas

ARCHIVO DEL BLOG

- ▼ 2011 (1133)
 - ▼ junio (51)
 - ▼ jun 07 (5)
 - Investigado
res
españoles
abren una
nueva vía
de di...
 - Retrasan la
progresió
n de un
tipo de
cáncer de
pul...
 - La malaria
es la
enfermed
ad
importad
a en
España
co...
 - La OMS
alerta de
que las
enfermed
ades
mentales
son...
 - Cerca de un

Investigadores españoles abren una nueva vía de diseño de fármacos

Investigadores del Instituto de Investigación Hospital del Mar (IMIM) y la Universitat Pompeu Fabra de Barcelona han conseguido reproducir y reconstruir el proceso completo de la unión de una molécula pequeña a su proteína diana, lo que abre una nueva vía en el diseño de nuevos fármacos.

Este avance permite calcular la afinidad y el tiempo de unión del fármaco con la proteína y conocer qué interacciones establece el fármaco para actuar, permitiendo así avanzar hacia el diseño más seguro y eficiente de nuevos fármacos.

Este innovador trabajo ayuda a ver un proceso que hasta ahora era invisible, y se basa en la captura de movimientos de moléculas pequeñas con una resolución de hasta un átomo, más allá de las capacidades técnicas actuales.

Mediante técnicas informáticas es posible representar las moléculas en su escala atómica y reproducir sus movimientos con una alta precisión matemática.

La comprensión de cómo se produce la unión de una proteína y una molécula, esta última provocando una respuesta biológica al ser reconocida por la primera, es de vital importancia para el diseño de nuevos medicamentos.

A pesar del progreso de la técnica, hasta ahora, ningún estudio había proporcionado una reconstrucción completa del citado proceso.

"El método proporciona no sólo la afinidad de unión y la cinética de la reacción, sino también información de la resolución atómica durante el proceso: sitios de unión, estados de transición y estados metaestables", ha explicado el coordinador del Laboratorio de Biofísica Computacional del Programa de Investigación en Informática Biomédica del IMIM y la UPF, Gianni de Fabritiis.

El coordinador ha destacado que esta metodología es directamente aplicable a otros sistemas moleculares, y, por tanto, de interés general en la investigación biomédica y farmacéutica.

Publicado por Newsletter del Siglo XXI en 11:50 PM 0 comentarios

Etiquetas: Sustancias

SALUD PÚBLICA -
COMISIÓN EUROPEA



NATIONAL
INSTITUTES OF
HEALTH IN USA



PUBLIC HEALTH
AGENCY OF
CANADA



HEALTH IN
SWITZERLAND

Retrasan la progresión de un tipo de cáncer de pulmón sin quimioterapia

Investigadores del Grupo Español de Cáncer de Pulmón (GECP) han conseguido aumentar en casi el doble la supervivencia libre de progresión de un subtipo de cáncer



ESPECIAL CHARLAS DIGITALES
Elecciones autonómicas y municipales 22 de mayo
 Lea los 46 encuentros que hemos organizado con los candidatos

Diario El Viajero Magazine Tienda Diseño Grupo S. XXI

Martes, 07 de junio de 2011. Actualizado a las 13:55 h.

Diario SIGLO XXI.com

Sobornar a la "poli" no es buena idea...

Diario digital independiente, plural y abierto

Buscar

Portada | Opinión | España | Mundo | Economía | Ciencia | Deportes | Fútbol | Cine y TV | Música | Libros | Gastronomía | Toros

Entrevistas y charlas | Especiales | Última Hora | Imágenes | Vídeos | El Tiempo

Sanidad

Investigadores españoles abren una nueva vía de diseño de fármacos

Agencias

0

M'agrada



Publicado el martes 7 de junio de 2011, 10:31 h.

| Comentar

BARCELONA, 7 (EUROPA PRESS)

Investigadores del Instituto de Investigación Hospital del Mar (IMIM) y la Universitat Pompeu Fabra de Barcelona han conseguido reproducir y reconstruir el proceso completo de la unión de una molécula pequeña a su proteína diana, lo que abre una nueva vía en el diseño de nuevos fármacos.

Este avance permite calcular la afinidad y el tiempo de unión del fármaco con la proteína y conocer qué interacciones establece el fármaco para actuar, permitiendo así avanzar hacia el diseño más seguro y eficiente de nuevos fármacos.

Este innovador trabajo ayuda a ver un proceso que hasta ahora era invisible, y se basa en la captura de movimientos de moléculas pequeñas con una resolución de hasta un átomo, más allá de las capacidades técnicas actuales.

Mediante técnicas informáticas es posible representar las moléculas en su escala atómica y reproducir sus movimientos con una alta precisión matemática.

La comprensión de cómo se produce la unión de una proteína y una molécula, esta última provocando una respuesta biológica al ser reconocida por la primera, es de vital importancia para el diseño de nuevos medicamentos.

A pesar del progreso de la técnica, hasta ahora, ningún estudio había proporcionado una reconstrucción completa del citado proceso.

"El método proporciona no sólo la afinidad de unión y la cinética de la reacción, sino también información de la resolución atómica durante el proceso: sitios de unión, estados de transición y estados metaestables", ha explicado el coordinador del Laboratorio de Biofísica Computacional del Programa de Investigación en Informática Biomédica del IMIM y la UPF, Gianni de Fabritiis.

El coordinador ha destacado que esta metodología es directamente aplicable a otros sistemas moleculares, y, por tanto, de interés general en la investigación biomédica y farmacéutica.



» Ampliar la imagen

PUBLICIDAD

Noticias relacionadas. Sanidad

- » Carlos Simón, del IVI y el CIPF, y Óscar Marín, del Instituto de Neurociencias de Alicante, premios Rey Jaime I
- » Zapatero felicita a los investigadores por el "hito" de haber descifrado el genoma de la leucemia linfática
- » Consiguen retrasar la progresión de un tipo de cáncer de pulmón sin necesidad de quimioterapia
- » La CE pide a Alemania que no lance más alertas sin pruebas sobre la E. coli
- » Detectan un posible caso de E.coli en un canadiense que estuvo en Alemania

Top noticias del día

Renault
 Clio Yahoo!
 1.2 75CV 5P
 con **25%** de dto.



PUBLICIDAD

PowerPoint Graphics
 Ready-to-use
 for Microsoft PowerPoint
 Direct Download
 DIRECT DOWNLOAD www.slideshop.com

PUBLICIDAD



MEDICAMENTOS

Investigadores definen una nueva vía para el diseño de fármacos

Científicos reproducen el proceso de unión entre una molécula y su proteína diana

Europa Press

Investigadores del Instituto de Investigación Hospital del Mar (IMIM) y la Universitat Pompeu Fabra de Barcelona han conseguido reproducir y reconstruir el proceso completo de la unión de una molécula pequeña a su proteína diana, lo que abre una nueva vía en el diseño de nuevos fármacos. Este avance permite calcular la afinidad y el tiempo de unión del fármaco con la proteína y conocer qué interacciones establece el fármaco para actuar, permitiendo así avanzar hacia el diseño más seguro y eficiente de nuevos fármacos. Este innovador trabajo ayuda a ver un proceso que hasta ahora era invisible, y se basa en la captura de movimientos de moléculas pequeñas con una resolución de hasta un átomo, más allá de las capacidades técnicas actuales.

Mediante técnicas informáticas es posible representar las moléculas en su escala atómica y reproducir sus movimientos. La comprensión de cómo se produce la unión de una proteína y una molécula, esta última provocando una respuesta biológica al ser reconocida por la primera, es de vital importancia para el diseño de nuevos medicamentos. A pesar del progreso de la técnica, hasta ahora, ningún estudio había proporcionado una reconstrucción completa del citado proceso. "El método proporciona información de la resolución atómica durante el proceso: sitios de unión, estados de transición y estados metaestables", afirma el coordinador del Laboratorio de Biofísica Computacional del Programa de Investigación en Informática Biomédica del IMIM y la UPF, Gianni de Fabritiis.

EROSKI CONSUMER

Científicos españoles abren una nueva vía para el diseño de fármacos

Han podido reconstruir el proceso completo de la unión de una molécula pequeña a su proteína diana

0

Me gusta

Sé el primero de tus amigos a quien le gusta esto.

7 de junio de 2011

Un equipo de investigadores del Instituto de Investigación Hospital del Mar (IMIM) y la Universidad Pompeu Fabra (UPF) de Barcelona ha conseguido reproducir y reconstruir el proceso completo de la unión de una molécula pequeña a su proteína diana, lo que abre una nueva vía en el diseño de nuevos fármacos.

Este avance permite calcular la afinidad y el tiempo de unión del fármaco con la proteína y conocer qué interacciones establece el fármaco para actuar, lo que permite avanzar hacia el diseño más seguro y eficiente de nuevos fármacos. Este innovador trabajo ayuda a ver un proceso que hasta ahora era invisible. Se basa en la captura de movimientos de moléculas pequeñas con una resolución de hasta un átomo, más allá de las capacidades técnicas actuales.

A través de técnicas informáticas es posible representar las moléculas en su escala atómica y reproducir sus movimientos con una alta precisión matemática. La comprensión de cómo se produce la unión de una proteína y una molécula, que provoca una respuesta biológica al ser reconocida por la primera, es de vital importancia para el diseño de nuevos medicamentos. A pesar del progreso de la técnica, hasta ahora ningún estudio había proporcionado una reconstrucción completa del citado proceso.

"El método proporciona no solo la afinidad de unión y la cinética de la reacción, sino también información de la resolución atómica durante el proceso: sitios de unión, estados de transición y estados metaestables", explica el coordinador del Laboratorio de Biofísica Computacional del Programa de Investigación en Informática Biomédica del IMIM y la UPF, Gianni de Fabritiis. El coordinador destaca que esta metodología es directamente aplicable a otros sistemas moleculares, y, por tanto, de interés general en la investigación biomédica y farmacéutica.

Accesibilidad Mapa Web Autores de las imágenes Creative Commons de esta página

PRESMANES
Joyeros

el soplo
cantabria
ven ahora, es el momento

Una cavidad única

[Contactar](#) [Recomendar](#) [Mapa Web](#)

[Portada](#) [Cantabria](#) [Nacional](#) [Mundo](#) [Deportes](#) [Cultura](#) [Sociedad](#) [Editorial](#) [UIMP](#) [Opinión](#)

CRÓNICA NEGRA EL RECETARIO DE PACO QUIRÓS **SALUD**

Editor: Carlos Magdalena Menchaca.

Introduzca una palabra

buscar

Santander [Cantabria](#) a 08 de Junio 2011

Investigadores españoles abren una nueva vía de diseño de fármacos

Salud - 07-06-2011 10:30:00

- Investigadores del Instituto de Investigación Hospital del Mar (IMIM) y la Universitat Pompeu Fabra de Barcelona han conseguido reproducir y reconstruir el proceso completo de la unión de una molécula pequeña a su proteína diana, lo que abre una nueva vía en el diseño de nuevos fármacos.



Este avance permite calcular la afinidad y el tiempo de unión del fármaco con la proteína y conocer qué interacciones establece el fármaco para actuar, permitiendo así avanzar hacia el diseño más seguro y eficiente de nuevos fármacos.

Este innovador trabajo ayuda a ver un proceso que hasta ahora era invisible, y se basa en la captura de movimientos de moléculas pequeñas con una resolución de hasta un átomo, más allá de las capacidades técnicas actuales.

Mediante técnicas informáticas es posible representar las moléculas en su escala atómica y reproducir sus movimientos con una alta precisión matemática.

La comprensión de cómo se produce la unión de una proteína y una molécula, esta última provocando una respuesta biológica al ser reconocida por la primera, es de vital importancia para el diseño de nuevos medicamentos.

A pesar del progreso de la técnica, hasta ahora, ningún estudio había proporcionado una reconstrucción completa del citado proceso.

"El método proporciona no sólo la afinidad de unión y la cinética de la reacción, sino también información de la resolución atómica durante el proceso: sitios de unión, estados de transición y estados metaestables", ha explicado el coordinador del Laboratorio de Biofísica Computacional del Programa de Investigación en Informática Biomédica del IMIM y la UPF, Gianni de Fabritiis.

El coordinador ha destacado que esta metodología es directamente aplicable a otros sistemas moleculares, y, por tanto, de interés general en la investigación biomédica y farmacéutica.

Comentarios(0) [Recomendar a un amigo](#) [Menéame](#)

0

Me gusta

¿Quieres enviar un comentario?

Comentario

Alias:

Introduzca el código:

4E9t1g

Enviar

LO MÁS VISTO DE: SOCIEDAD

Un año de internamiento para un menor por agresión sexual a dos chicas

Detenida una pareja por apropiarse de más de 21.000 euros de una anciana ingresada en un geriátrico

El Gobierno pone a microbiólogos "en alerta" para estudiar la nueva bacteria 'E.coli' detectada en Alemania

Piden tres años de prisión por vender cocaína oculta en los agarraderos del techo de su coche

Herida una mujer al ser atropellada por un turismo en un paso de peatones en Santander

El laboratorio de referencia español ratifica que los pepinos no causaron el brote de 'E.coli' en Alemania

Las CC.AA. "saludan" y dan su visto bueno al anteproyecto de ley de Muerte Digna

Dos militares de EEUU destinados en Alemania podrían estar infectados por 'E.coli'

Detenido por robar en una guardería en la que hizo una reforma y no devolvió las llaves

La OMS dice que la cepa de 'e.coli' encontrada en los pacientes alemanes es desconocida hasta ahora

PRESMANES
Joyeros

COLUMNA DE OPINIÓN

Carlos Magdalena Menchaca .-

**Islandia juzga a su ex primer ministro
¿Se juzgará a Zapatero por
"presuntamente" mentir y arruinar
España?**

No puede pasar desapercibidos el hecho de que los islandeses, europeos y demócratas, con gran criterio han decidido sentar en el banquillo a su ex presidente por haber llevado a la quiebra a Islandia. El señor Zapatero y su ministro de confianza el señor Blanco se jactaban, se reían públicamente cuando eran preguntados por la crisis hace cuatro años y contestaban entre grandes risotadas con la famosa frase de, ¡qué crisis!...

Leer opinión

Comentarios(3)

Alfonso Campuzano .-

Prevención de la osteoporosis

El facultativo médico especialista, allá por los años sesenta del siglo pasado, sólo disponía de calcitonina, administrada vía inyectable, una hormona secretada por la glándula



DEL IMIM Y LA UNIVERSITAT POMPEU FABRA

Investigadores españoles abren una nueva vía de diseño de fármacos

Europa Press

BARCELONA, 7 (EUROPA PRESS)

Investigadores del Instituto de Investigación Hospital del Mar (IMIM) y la Universitat Pompeu Fabra de Barcelona han conseguido reproducir y reconstruir el proceso completo de la unión de una molécula pequeña a su proteína diana, lo que abre una nueva vía en el diseño de nuevos fármacos.

Este avance permite calcular la afinidad y el tiempo de unión del fármaco con la proteína y conocer qué interacciones establece el fármaco para actuar, permitiendo así avanzar hacia el diseño más seguro y eficiente de nuevos fármacos.

Este innovador trabajo ayuda a ver un proceso que hasta ahora era invisible, y se basa en la captura de movimientos de moléculas pequeñas con una resolución de hasta un átomo, más allá de las capacidades técnicas actuales.

Mediante técnicas informáticas es posible representar las moléculas en su escala atómica y reproducir sus movimientos con una alta precisión matemática.

La comprensión de cómo se produce la unión de una proteína y una molécula, esta última provocando una respuesta biológica al ser reconocida por la primera, es de vital importancia para el diseño de nuevos medicamentos.

A pesar del progreso de la técnica, hasta ahora, ningún estudio había proporcionado una reconstrucción completa del citado proceso.

"El método proporciona no sólo la afinidad de unión y la cinética de la reacción, sino también información de la resolución atómica durante el proceso: sitios de unión, estados de transición y estados metaestables", ha explicado el coordinador del Laboratorio de Biofísica Computacional del Programa de Investigación en Informática Biomédica del IMIM y la UPF, Gianni de Fabritiis.

El coordinador ha destacado que esta metodología es directamente aplicable a otros sistemas moleculares, y, por tanto, de interés general en la investigación biomédica y farmacéutica.

© Canarias al Día, 2008

canariasahora.es

Sociedad / 7/06/2011 (09:31 h.)

BARCELONA

Investigadores españoles abren una nueva vía de diseño de fármacos

Investigadores del Instituto de Investigación Hospital del Mar (IMIM) y la Universitat Pompeu Fabra de Barcelona han conseguido reproducir y reconstruir el proceso completo de la unión de una molécula pequeña a su proteína diana, lo que abre una nueva vía en el diseño de nuevos fármacos.

BARCELONA, 7 (EUROPA PRESS)

Investigadores del Instituto de Investigación Hospital del Mar (IMIM) y la Universitat Pompeu Fabra de Barcelona han conseguido reproducir y reconstruir el proceso completo de la unión de una molécula pequeña a su proteína diana, lo que abre una nueva vía en el diseño de nuevos fármacos.

Este avance permite calcular la afinidad y el tiempo de unión del fármaco con la proteína y conocer qué interacciones establece el fármaco para actuar, permitiendo así avanzar hacia el diseño más seguro y eficiente de nuevos fármacos.

Este innovador trabajo ayuda a ver un proceso que hasta ahora era invisible, y se basa en la captura de movimientos de moléculas pequeñas con una resolución de hasta un átomo, más allá de las capacidades técnicas actuales.

Mediante técnicas informáticas es posible representar las moléculas en su escala atómica y reproducir sus movimientos con una alta precisión matemática.

La comprensión de cómo se produce la unión de una proteína y una molécula, esta última provocando una respuesta biológica al ser reconocida por la primera, es de vital importancia para el diseño de nuevos medicamentos.

A pesar del progreso de la técnica, hasta ahora, ningún estudio había proporcionado una reconstrucción completa del citado proceso.

"El método proporciona no sólo la afinidad de unión y la cinética de la reacción, sino también información de la resolución atómica durante el proceso: sitios de unión, estados de transición y estados metaestables", ha explicado el coordinador del Laboratorio de Biofísica Computacional del Programa de Investigación en Informática Biomédica del IMIM y la UPF, Gianni de Fabritiis.

El coordinador ha destacado que esta metodología es directamente aplicable a otros sistemas moleculares, y, por tanto, de interés general en la investigación biomédica y farmacéutica.

Martes, junio 7th, 2011 | Publicado por [Canarias](#)

Investigadores españoles abren una nueva vía de diseño de fármacos

M'agrada

Sigues el primer dels teus amics a qui li agrada.



Investigadores del Instituto de Investigación Hospital del Mar (IMIM) y la Universitat Pompeu Fabra de Barcelona han conseguido reproducir y reconstruir el proceso completo de la unión de una molécula pequeña a su proteína diana, lo que abre una nueva vía en el diseño de nuevos fármacos.

Este avance permite calcular la afinidad y el tiempo de unión del fármaco con la proteína y conocer qué

interacciones establece el fármaco para actuar, permitiendo así avanzar hacia el diseño más seguro y eficiente de nuevos fármacos.

Este innovador trabajo ayuda a ver un proceso que hasta ahora era invisible, y se basa en la captura de movimientos de moléculas pequeñas con una resolución de hasta un átomo, más allá de las capacidades técnicas actuales.

Mediante técnicas informáticas es posible representar las moléculas en su escala atómica y reproducir sus movimientos con una alta precisión matemática.

La comprensión de cómo se produce la unión de una proteína y una molécula, esta última provocando una respuesta biológica al ser reconocida por la primera, es de vital importancia para el diseño de nuevos medicamentos.

A pesar del progreso de la técnica, hasta ahora, ningún estudio había proporcionado una reconstrucción completa del citado proceso.

“El método proporciona no sólo la afinidad de unión y la cinética de la reacción, sino también información de la resolución atómica durante el proceso: sitios de unión, estados de transición y estados metaestables”, ha explicado el coordinador del Laboratorio de Biofísica Computacional del Programa de Investigación en Informática Biomédica del IMIM y la UPF, Gianni de Fabritiis.

El coordinador ha destacado que esta metodología es directamente aplicable a otros sistemas moleculares, y, por tanto, de interés general en la investigación biomédica y farmacéutica.

INVESTIGADORES LOGRAN AVANCES EN EL DISEÑO MÁS EFICIENTE DE LOS FÁRMACOS

7 de Junio de 2011

El coordinador de la investigación ha expresado su esperanza de que estos ensayos puedan llevarse lo antes posible a la práctica: "Esperamos colaborar con empresas farmacéuticas para que el diseño de fármacos se pueda optimizar más fácilmente".

www.efe.com

Investigadores del [Instituto de Investigación del Hospital del Mar](#) y de la [Universidad Pompeu Fabra](#) han logrado reproducir un proceso completo de la unión de un fármaco con la proteína a la que va dirigida, lo que puede permitir avanzar en un diseño más seguro y eficiente de nuevos medicamentos.

La investigación, que publica la revista [Proceedings of the National Academy of Sciences \(PNAS\)](#), ha sido coordinada por el científico Gianni de Fabritiis, coordinador del Laboratorio de Biofísica Computacional del Programa de Investigación e Informática del Instituto de Investigación de Hospital del Mar y de la Universidad Pompeu Fabra.

De Fabritiis ha explicado a EFE que el estudio se ha tenido que realizar con técnicas informáticas ya que experimentalmente no se pudo ver, de forma que en la simulación del ensayo se han utilizado tarjetas gráficas.

El coordinador de la investigación ha expresado su esperanza de que estos ensayos puedan llevarse lo antes posible a la práctica: "Esperamos colaborar con empresas farmacéuticas para que el diseño de fármacos se pueda optimizar más fácilmente".

Gianni de Fabritiis cree que los resultados de la investigación suponen una herramienta novedosa en la fase de desarrollo del fármaco, porque hasta ahora en el proceso de diseño de un fármaco se utilizaban "otras herramientas, pero que no son tan exactas como esta".

El investigador se ha mostrado esperanzado de que el estudio pueda ayudar a "cambiar mucho la manera de desarrollar un fármaco, puede acortar el tiempo de investigación y hacerlo más económico".

Este avance permite calcular la afinidad y el tiempo de unión del fármaco con la proteína y conocer qué interacciones establece el fármaco para actuar, permitiendo avanzar hacia el diseño más seguro y eficiente de nuevos medicamentos.

El ensayo ayuda a ver un proceso que hasta ahora era invisible y por lo tanto desconocido, abriendo una nueva vía en el diseño de nuevos medicamentos.

El proceso de unión de un medicamento, en general una molécula pequeña, a su proteína diana es muy dinámico y depende de interacciones a escala nanométrica (mil millones de veces más pequeño que un metro) y pasa a escalas de tiempo del orden de nano/micros-segundos (miles de millones de veces más rápido que un segundo).

La captura de movimientos de moléculas pequeñas con una resolución de hasta un átomo está mas allá de las capacidades técnicas actuales. No obstante, mediante técnicas informáticas, es posible representar las moléculas en su escala atómica y reproducir sus movimientos con una alta precisión matemática.

La comprensión de como se produce la unión de una proteína y una molécula, esta última provocando una respuesta biológica al ser reconocida por la primera (ligando), es de vital importancia para el diseño de nuevos medicamentos.

[[IMPRIMIR](#)]

[[CERRAR VENTANA](#)]



08 Junio 2011

04:01:05

[Portada](#)
[Valladolid](#)
[Castilla y León](#)
[Nacional](#)
[Internacional](#)
[Economía](#)
[Deportes](#)
[Cultura](#)
[Noticias Indiscretas](#)
[La Otra](#)

[Portada](#)

[Elecciones 2011](#)

[Facebook](#)
[Twitter](#)
[RSS](#)

Investigadores españoles abren una nueva vía de diseño de fármacos

MARTES, 07 DE JUNIO DE 2011 10:31



Pastillas, píldoras, fármacos

Investigadores del Instituto de Investigación Hospital del Mar (IMIM) y la Universitat Pompeu Fabra de Barcelona han conseguido reproducir y reconstruir el proceso completo de la unión de una molécula pequeña a su proteína diana, lo que abre una nueva vía en el diseño de nuevos fármacos. BARCELONA, 7 (EUROPA PRESS)

Este avance permite calcular la afinidad y el tiempo de unión del fármaco con la proteína y conocer qué interacciones establece el fármaco para actuar, permitiendo así avanzar hacia el diseño más seguro y eficiente de nuevos fármacos.

Este innovador trabajo ayuda a ver un proceso que hasta ahora era invisible, y se basa en la captura de movimientos de moléculas pequeñas con una resolución de hasta un átomo, más allá de las capacidades técnicas actuales.

Mediante técnicas informáticas es posible representar las moléculas en su escala atómica y reproducir sus movimientos con una alta precisión matemática.

La comprensión de cómo se produce la unión de una proteína y una molécula, esta última provocando una respuesta biológica al ser reconocida por la primera, es de vital importancia para el diseño de nuevos medicamentos.

A pesar del progreso de la técnica, hasta ahora, ningún estudio había proporcionado una reconstrucción completa del citado proceso.

El método proporciona no sólo la afinidad de unión y la cinética de la reacción, sino también información de la resolución atómica durante el proceso: sitios de unión, estados de transición y estados metaestables", ha explicado el coordinador del Laboratorio de Biofísica Computacional del Programa de Investigación en Informática Biomédica del IMIM y la UPF, Gianni de Fabritiis.

El coordinador ha destacado que esta metodología es directamente aplicable a otros sistemas moleculares, y, por tanto, le interés general en la investigación biomédica y farmacéutica.

DESTACADOS

De generales y candidatos

¿Es Rubalcaba la mejor opción para el PSOE?

Veamos. Se trata de un político experimentado, con una gran preparación académica, notable dialéctica y buen manejo de los medios. Y sin...



MÁS LEIDAS

[Sanidad quiere que las cajetillas de tabaco cuesten el doble para equiparar a España al resto de países de su entorno](#)

[PNV traslada a Bildu que no se sumará "al bloque" contra la coalición](#)

[Barreda no acompaña a Chacón en el mitin central del PSOE](#)

[Lorca sufre más de una veintena de réplicas](#)

[Bildu se marca como objetivo gobernar en Guipúzcoa y San Sebastián](#)

[López dice que el PNV incurrirá en una "irresponsabilidad" si permite los gobiernos de Bildu](#)

[Zapatero acusa de mentir a quienes hablan de recortes sociales](#)

[Pons vincula a parte de 'Democracia real' con la "extrema izquierda del PSOE"](#)

[Patxi López mantiene ante Zapatero que hay que celebrar un Congreso](#)

[PNV reitera que presentara a sus propios candidatos](#)





Fármacos más eficientes

Investigadores del Hospital del Mar y la UPF han logrado reproducir un proceso completo de la unión de un fármaco con la proteína a la que va dirigida, lo que puede permitir un diseño más seguro y eficiente de nuevos medicamentos.



Username

 Password

 Remember Me

Project

- Home
- News
- Objectives
- VPH 2010
- Overview
- VPH Links
- Contact Us
- Archives

Activities

- Exemplar Projects
- Roadmap
- Publications
- Dissemination Material
- VPH Events
- Event archive

VPH Initiative

- Background
- VPH NoE Membership
- VPH Projects
- BioMedTown
- VPH Initiative Forum
- VPH Repository
- VPH Jobs

<< June 2011 >>

Mo	Tu	We	Th	Fr	Sa	Su
		1	2	3	4	5
6	7	8	9	10	11	12
13	14	15	16	17	18	19
20	21	22	23	24	25	26
27	28	29	30			

VPH NoE Exemplar Projects and the VPH ToolKit - 4. Multi-scale simulation and prediction of the drug safety problems related with hERG [PDF](#) | [Print](#) | [E-mail](#)

Page 5 of 11

4. Multi-scale simulation and prediction of the drug safety problems related with hERG

Lead: *IMIM, Gianni De Fabritis*

URL: <http://multiscalelab.org/VPH>

An important field of application of the VPH concept is the drug development process since multi-scale simulations can be extremely useful for the understanding of the physiological mechanisms related with the therapeutic efficacy of the drugs, as well as with their adverse events (drug safety problems). In order to get useful in-silico predictions of the efficacy and safety of drugs, we require computational models that have to be sensitive to the differential molecular characteristics of the drugs, which, on the other hand, have to be coupled with models simulating the biological system or organ in which the therapeutic effectiveness or adverse events are observed. The hERG-related cardiac adverse effects of drugs are a paradigmatic example of this approach. Although other potential targets for cardiac adverse effects exist, the vast majority of drugs associated with pathological prolongations of the QT segment of the electrocardiogram are known to interact with the hERG potassium channel. The differential interaction of series of drugs under development with the hERG potassium channel can be simulated at the molecular scale by means of atomistic simulations coupled to drug discovery tools based on quantitative structure activity relationships. In this way one will be able to obtain quantitative predictions of electrophysiological parameters of each drug that could be used in both mesoscopic simulations dealing with macromolecular behaviour of the channels and, more importantly, macroscopic electromechanical simulations of the heart with the aim of predicting the change in the QT segment generated by the drugs under study.

This approach will be based on tools developed in several projects that are focused on the multiscale processes modelling and their computational implementation (PS3Grid and EC-STREP QoSGrid) as well as on the translational research aspects of such a multilevel problem (EC-STREP BioBridge). This seed EP will aim at integrating existing software tools dealing with the several levels of complexity of the QT elongation. The expected outcome of the next step will be the standardisation of formats for easy integration of simulation scales and the computational implementation of the different levels of detail.

[<< Prev - Next >>](#)

Article Index

- VPH NoE Exemplar Projects and the VPH ToolKit
1. A multi-organ Core Model of arterial pressure and body fluids homeostasis
 2. Integrated multi-level modelling of the musculoskeletal system
 3. The Vertical and Horizontal Atherome (WHAM)
 4. Multi-scale simulation and prediction of the drug safety problems related with hERG
 5. Digital Patient Working Group: Modelling and visualising brain function and pathophysiology
 6. Establishing ontology-based methods for the VPH ToolKit to improve interoperability between data and models: the Guyton case study
 7. CIGENE: Integrating genetic theory and genomic data with multiscale models in a population context
 8. USFD: The NoE, Infrastructure and the Challenge of Call6
 9. VIP for VPH : Execution of medical image simulation workflows on DEISA through workflow interoperability between the Virtual Imaging Platform and the VPH toolkit
- [EP Proposals](#)
[All Pages](#)