

CON MODELADO MOLECULAR DISEÑAN NUEVOS FÁRMACOS EN CORTO TIEMPO

La técnica permite analizar con detalle gran cantidad de compuestos y seleccionar los más eficientes

Mediante el modelado molecular, un grupo multidisciplinario conformado por investigadores politécnicos, del Centro de Investigación y de Estudios Avanzados (CINVESTAV) y especialistas extranjeros diseñan en sólo dos meses nuevos fármacos para tratar leucemia, Alzheimer, Virus de Inmunodeficiencia Humana (VIH) e influenza AH1N1, entre otros.

Las investigaciones también permitirán mejorar algunos medicamentos existentes, con el propósito de reducir o eliminar los efectos secundarios que generan al organismo humano.

El titular del proyecto que se ejecuta en la Escuela Superior de Medicina (ESM), José Correa Basurto, explicó que con el modelado molecular es posible probar una gran cantidad de compuestos, con lo cual se ahorra tiempo, recursos humanos y económicos, debido a que no es necesario diseñar, sintetizar y evaluar experimentalmente cada uno de ellos, sino únicamente los mejores.

Detalló que los *clusters* computacionales son infraestructura diseñada y armada por Ian Ilizaliturri Flores, alumno del Doctorado de Biotecnología, y por Jorge Trigueros y Jesús Cedillo Álvarez, profesores de la Escuela Superior de Cómputo (ESCOM) y del Centro de Innovación y Desarrollo Tecnológico en Cómputo (CIDETEC), respectivamente.

De esta manera, los investigadores cuentan con una herramienta superior a la de un microscopio electrónico, ya que éste sólo proporciona imágenes bidimen-



El equipo de investigación diseña en sólo dos meses medicamentos para el tratamiento de enfermedades como leucemia, Alzheimer, VIH e influenza AH1N1

sionales, mientras que con el modelado molecular es posible estudiar las cavidades, distancias y superficies de las estructuras tridimensionales de las moléculas, así como analizar la forma en que se acoplan los átomos y las cargas en diferentes regiones.

José Correa apuntó que con el apoyo de la Fundación Miguel Alemán trabaja en el desarrollo de un grupo de fármacos con posible actividad antineoplásica, específicamente para el tratamiento de leucemia. “Estamos desarrollando inhibidores de la enzima *Histona Desacetilasa*”.

Refirió que hasta el momento los resultados son alentadores porque se ha observado una inhibición de las células tumorales, por lo que realizarán microarreglos de ácido desoxirribonucleico (ADN)

para determinar los genes que se apagan y encienden con éste y otros compuestos sintetizados.

El científico recalcó la importancia de patentar a nivel mundial el diseño, síntesis y efecto *in vitro* del nuevo fármaco inhibidor de la *Histona Desacetilasa* para que la industria farmacéutica efectúe pruebas a otro nivel y pueda comercializarse, lo que sucedería en 15 años aproximadamente.

Por último, Correa Basurto aseveró que en México el modelado molecular es una área muy poco explotada. De hecho, aunque existen otros dos grupos de investigación en el país, el de los investigadores del IPN es el más consolidado porque lo integran especialistas de diversas ramas del conocimiento.