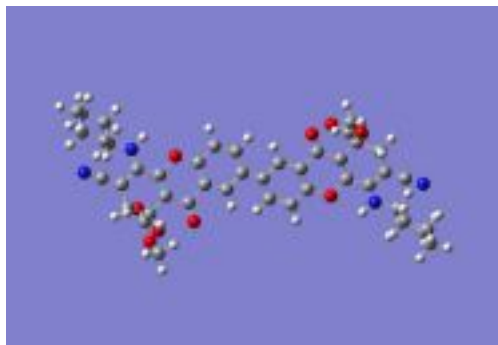


Investigadores de la UEx diseñan una nueva reacción química mediante cálculos mecanocuánticos en LUSITANIA

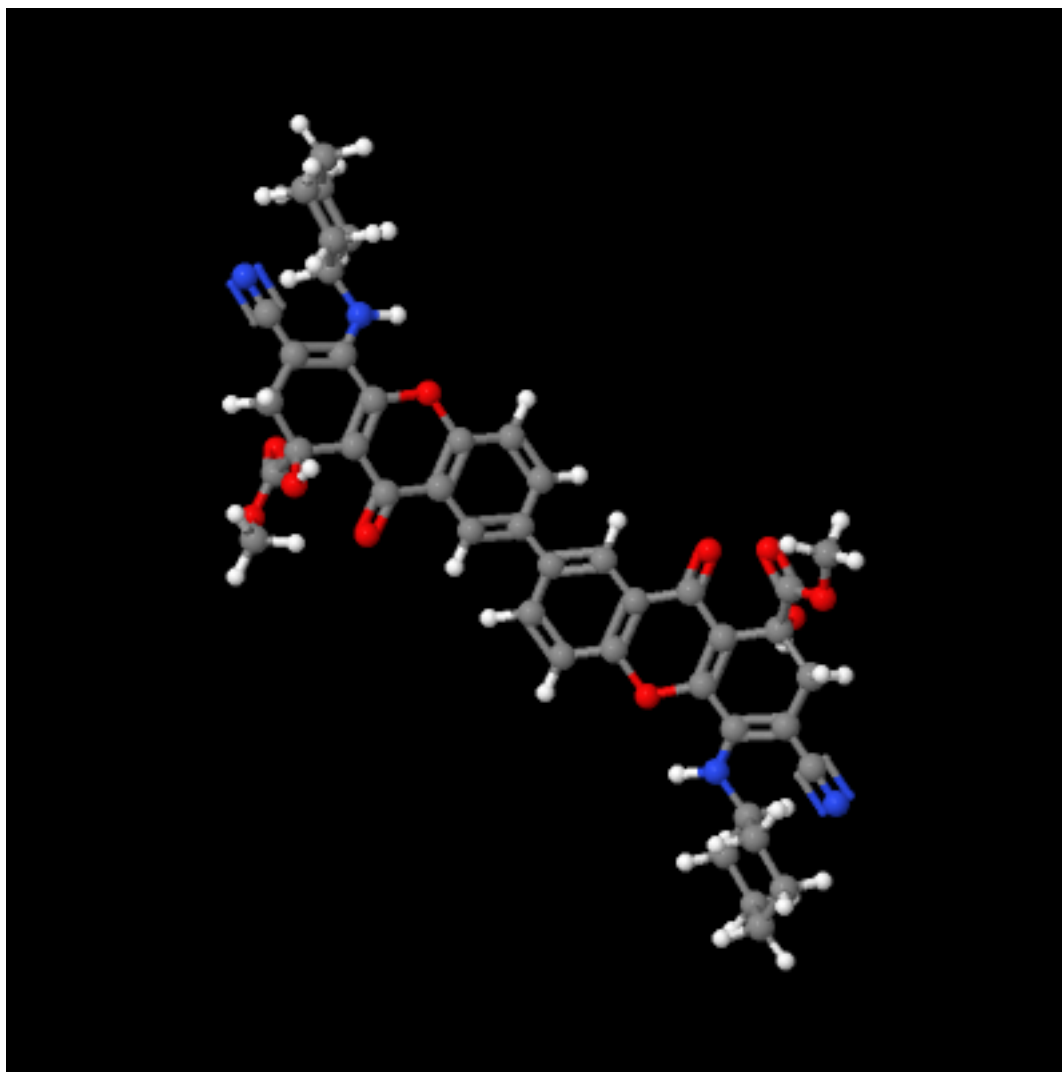
• Wed, 10/06/2015



Investigadores del Laboratorio de Química Bioorgánica y Biofísica de Membranas de la [Universidad de Extremadura](#) [1] han desarrollado, en colaboración con [COMPUTAEX](#) [2], una síntesis rápida y eficiente de compuestos de la familia de los ergocromos, micotoxinas de gran interés por sus propiedades antifúngicas, antibióticas y anticancerígenas.

Hasta el momento, la obtención de estos compuestos de estructura dihidroxantónica requería procedimientos sintéticos complejos en múltiples etapas. Con la ayuda de cálculos mecanocuánticos realizados en el [supercomputador LUSITANIA](#) [3], se ha diseñado una nueva reacción tándem multicomponente que permite obtener los compuestos deseados en un solo paso de síntesis. Otra gran ventaja de esta metodología es que da acceso, con muy buenos rendimientos y en condiciones muy suaves, a una variedad de dihidroxantonas con una gran diversidad estructural, una característica de gran importancia para el descubrimiento de nuevos fármacos.

En una importante aplicación, se ha sintetizado un análogo del ácido secalónico en tan sólo cuatro pasos de reacción a partir de bisfenol, un producto comercial común. El ácido secalónico es un codiciado objetivo sintético debido a su potente actividad biológica antitumoral e inhibidora del VIH.



Estos resultados se han publicado en un artículo titulado "Regioselective Tandem [4+1]-[4+2] Synthesis of Amino-Substituted Dihydroxanthones and Xanthones", en la prestigiosa revista [Journal of Organic Chemistry](#) [4].
 Mas información:

- [Regioselective Tandem \[4+1\]-\[4+2\] Synthesis of Amino-Substituted Dihydroxanthones and Xanthones](#) [5]

Noticias relacionadas:

- [La capacidad de cálculo del supercomputador Lusitania permite a investigadores de la UEx diseñar una síntesis rápida de fármacos contra el cáncer, antibióticos y antifúngicos](#) [6] [GobEx]
- [Investigadores de la UEx diseñan una síntesis rápida de fármacos contra el cáncer, antibióticos y antifúngicos](#) [7] [Digital Extremadura]
- [La UEx diseña una síntesis de fármacos contra el cáncer](#) [8] [Europa Press]
- [La capacidad de cálculo de un supercomputador permite a la UEx diseñar una síntesis de fármacos contra el cáncer](#) [9] [20 minutos]
- [La capacidad de cálculo de un supercomputador permite a la UEx diseñar una síntesis de fármacos contra el cáncer](#) [10] [El Economista]
- [La capacidad de cálculo de un supercomputador permite a la UEx diseñar una síntesis de fármacos contra el cáncer](#) [11] [Plasencia Directo]
- [La capacidad de cálculo de un supercomputador permite a la UEx diseñar una síntesis de fármacos contra el cáncer](#) [12] [Región Digital]
- [La capacidad de cálculo de un supercomputador permite a la UEx diseñar una síntesis de fármacos contra el cáncer](#) [13] [Directo Extremadura]
- [La capacidad de cálculo de un supercomputador permite a la UEx diseñar una síntesis de fármacos contra el cáncer](#) [14] [Mérida Directo]
- [La capacidad de cálculo de un supercomputador permite a la UEx diseñar una síntesis de fármacos contra el cáncer](#) [15] [Gente Digital]
- [La capacidad de cálculo de un supercomputador permite a la UEx diseñar una síntesis de fármacos contra el cáncer](#) [16] [teinteresa.es]
- [El superordenador Lusitania ayuda a mejorar los fármacos](#) [17] [Hoy]
- [El supercomputador Lusitania permite diseñar una síntesis de fármacos contra el cáncer](#) [18] [El Diario]
- [El supercomputador Lusitania permite a investigadores de la UEx diseñar una síntesis rápida de fármacos contra el](#)

- [cáncer, antibióticos y antifúngicos](#) [19] [extremadura.com]
- [La UEx diseña una síntesis de fármacos contra el cáncer](#) [20] [Diario Cáceres]
 - [Investigadores de la UEx diseñan una síntesis rápida de fármacos contra el cáncer, antibióticos y antifúngicos](#) [21] [Notinet]
 - [Investigadores de la UEx diseñan una síntesis rápida de fármacos contra el cáncer, antibióticos y antifúngicos](#) [22] [No Solo Mérida]
 - [La capacidad de cálculo de un supercomputador permite a la UEx diseñar una síntesis de fármacos contra el cáncer](#) [23] [Pharma Market]
 - [El Lusitania permite diseñar una síntesis rápida de fármacos contra el cáncer](#) [24] [Extremadura 7 Días]
 - [La capacidad de cálculo de un supercomputador permite a la UEx diseñar una síntesis de fármacos contra el cáncer](#) [25] [Badajoz Directo]
 - [La capacidad de cálculo de un supercomputador permite a la UEx diseñar una síntesis de fármacos contra el cáncer](#) [26] [La Vanguardia]
 - [El supercomputador extremeño Lusitania se incorpora a la red española de la materia](#) [27] [Cáceres Directo]

Source

URL:<https://web.computaex.es/en/noticias/10062015-investigadores-uex-publican-revista-internacional-sobre-quimica-organica-gracias>

Links

[1] <http://www.unex.es/> [2] <https://web.computaex.es/fundacion> [3] <http://www.cenits.es/cenits/lusitania> [4] <http://pubs.acs.org/journal/joceah> [5] <https://web.computaex.es/enlaces/publicaciones/regioselective-tandem-4-1-4-2-synthesis-amino-substituted-dihydroxanthones-and> [6] <http://www.gobex.es/comunicacion/noticia?idPub=16939#.VXRnZfntlBc> [7] <http://digitalextremadura.com/not/68570/iinvestigadores-de-la-uex-disenan-una-sintesis-rapida-de-farmacos-contra-el-cancer-antibioticos-y-antifungicos> [8] <http://www.europapress.es/extremadura/noticia-calculo-supercomputador-permite-uex-disenar-farmacos-contra-cancer-20150612120344.html> [9] <http://www.20minutos.es/noticia/2487336/0/capacidad-calculo-supercomputador-permite-uex-disenar-sintesis-farmacos-contra-cancer/#xtor=AD-15&xts=467263> [10] <http://eleconomista.es/espana/noticias/6787354/06/15/La-capacidad-de-calculo-de-un-supercomputador-permite-a-la-UEx-disenar-una-sintesis-de-farmacos-contra-el-cancer.html#Kku8NasTtkbPwjgT> [11] <http://www.plasenciadirecto.com/region/2015-06-12/extremadura/regional/8689/la-capacidad-de-calculo-de-un-supercomputador-permite-a-la-uex-disenar-una-sintesis-de-farmacos-contra-el-cancer.html> [12] <http://www.regiondigital.com/noticias/ultima-hora/239604-la-capacidad-de-calculo-de-un-supercomputador-permite-a-la-uex-disenar-una-sintesis-de-farmacos-contra-el-cancer.html> [13] http://www.directoextremadura.com/noticias_region/2015-06-12/10/8689/la-capacidad-de-calculo-de-un-supercomputador-permite-a-la-uex-disenar-una-sintesis-de-farmacos-contra-el-cancer.html [14] <http://www.meridirecto.com/region/2015-06-12/extremadura/regional/8689/la-capacidad-de-calculo-de-un-supercomputador-permite-a-la-uex-disenar-una-sintesis-de-farmacos-contra-el-cancer.html> [15] <http://www.gentedigital.es/badajoz/noticia/1687101/la-capacidad-de-calculo-de-un-supercomputador-permite-a-la-uex-disenar-una-sintesis-de-farmacos-contra-el-cancer/> [16] http://www.teinteresa.es/extremadura/badajoz/capacidad-supercomputador-UEx-sintesis-farmacos_0_1374462969.html [17] <http://www.hoy.es/extremadura/201506/13/superordenador-lusitania-ayuda-mejorar-20150613003159-v.html> [18] http://www.eldiario.es/eldiarioex/sociedad/supercomputador_Lusitania_cancer_0_397911161.html [19] http://www.extremadura.com/general/el_supercomputador_lusitania_permite_a_investigadores_de_la_uex_disenar_una_sintesis_rapida_de_farmacos_contra_el_cancer_antibioticos_y_antifungicos [20] http://www.diariocaceres.com/_n3194895_La_UEx_diseña_una_sintesis_de_farmacos_contra_el_cancer.html [21] <http://web.notinet.org/iinvestigadores-de-la-uex-disenan-una-sintesis-rapida-de-farmacos-contra-el-cancer-antibioticos-y-antifungicos/> [22] http://nosolomerida.es/web/index.php?option=com_content&view=article&id=41941:investigadores-de-la-uex-disenan-una-sintesis-rapida-de-farmacos-contra-el-cancer-antibioticos-y-antifungicos&catid=55:extremadura&Itemid=84 [23] <http://www.pharma-market.es/vernoticia.php?volver=¬icia=2992> [24] <http://www.extremadura7dias.com/noticia/el-lusitania-permite-disenar-una-sintesis-rapida-de-farmacos-contra-el-cancer> [25] <http://www.badajozdirecto.com/region/2015-06-12/extremadura/regional/8689/la-capacidad-de-calculo-de-un-supercomputador-permite-a-la-uex-disenar-una-sintesis-de-farmacos-contra-el-cancer.html> [26] <http://www.lavanguardia.com/local/extremadura/20150612/54432786533/la-capacidad-de-calculo-de-un-supercomputador-permite-a-la-uex-disenar-una-sintesis-de-farmacos.html> [27] <http://www.caceresdirecto.com/region/2015-04-29/extremadura/regional/7967/el-supercomputador-extremeño-lusitania-se-incorpora-a-la-red-espanola-de-la-materia.html>