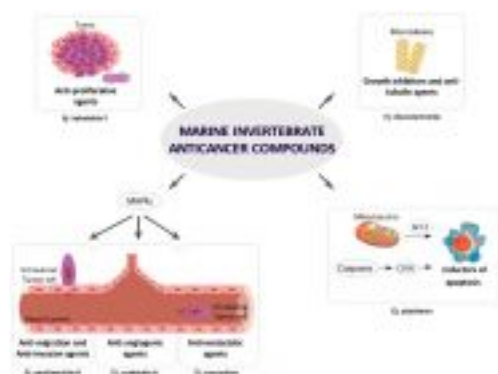


CénitS colabora en la búsqueda de anticancerígenos junto a investigadores de la Universidad Miguel Hernández de Elche y el Instituto de Salud Carlos III de Mallorca

• Thu, 20/07/2017



Un estudio sobre los compuestos anticancerígenos marinos existentes y el uso de cribado virtual para la detección de fármacos contra el cáncer, ha sido publicado en la revista internacional [Molecules](#) [1], por investigadores de la [Universidad Miguel Hernández de Elche](#) [2] y el Instituto de Salud Carlos III de Mallorca. Los trabajos de cribado virtual, que han permitido identificar y caracterizar los mejores compuestos, han sido realizados utilizando [LUSITANIA II](#) [3], en un trabajo que abre el camino a otros investigadores, exponiendo un conjunto delimitado de resultados para ser evaluados, que permitirán avanzar en la lucha contra el cáncer.

En el estudio, los investigadores han realizado una revisión de los principales fármacos de origen marino que presentan propiedades muy interesantes en el desarrollo de fármacos para la lucha contra el cáncer. Esta revisión resume los compuestos más recientemente aislados, derivados o sintéticamente obtenidos de invertebrados marinos que han mostrado potencial como terapias contra el cáncer en las últimas dos décadas. Sin lugar a dudas, los recursos marinos proporcionan una diversidad bioquímica inestimable y sin explotar y muestran un mayor potencial que los recursos vegetales para el descubrimiento de nuevos fármacos contra el cáncer, con aproximadamente el 18% de todos los MNP (Marine Natural Products, productos naturales marinos) descubiertos hasta el momento.

Un número significativo de compuestos marinos han mostrado potenciales actividades anticancerígenas contra las diferentes características del cáncer. Los enfoques clásicos basados en la selección de extractos derivados de organismos marinos utilizando técnicas *in vitro* tienen una aplicabilidad limitada. El uso de Omics se ha extendido a la investigación sobre MNPs para el descubrimiento de fármacos anticancerígenos, ofreciendo nuevas oportunidades para el descubrimiento de objetivos terapéuticos o biomarcadores más específicos contra el cáncer. Esto sin duda permitirá el desarrollo de la "medicina de precisión" en un futuro próximo. Este gran cribado *in vitro* está generando un número ilimitado de compuestos que requieren el uso de pruebas virtuales o métodos computacionales para reducir el amplio espacio químico (miles de compuestos) a un número experimentalmente accesible de compuestos.

La combinación de las técnicas de Omics con el cribado virtual para la selección de compuestos contra objetivos específicos del cáncer se está convirtiendo en el método de elección en esta área. Sin embargo, se debe tener precaución en la selección de compuestos anticancerígenos para el cribado virtual. La comparación realizada en esta revisión, que incluye las propiedades de los 168 compuestos anticancerígenos más prometedores de la base de datos GDSC, demuestra que el uso de técnicas de filtrado regular basadas en parámetros ADMET puede descartar muchos compuestos con actividad anticancerígena potencial.

Por último, se ha hecho pública en la web <http://docking.umh.es> [4], creada por estos investigadores, una nueva biblioteca de MNPs de acceso público para fines *in silico* y ya se está probando para diferentes objetivos de interés en el cáncer.

Artículo:

- Ruiz-Torres, V.; Encinar, J.A.; Herranz-López, M.; Pérez-Sánchez, A.; Galiano, V.; Barrajón-Catalán, E.; Micol, V. [An Updated Review on Marine Anticancer Compounds: The Use of Virtual Screening for the Discovery of Small-Molecule Cancer Drugs](#) [5]. *Molecules* 2017, 22, 1037.

Más información:

- [An Updated Review on Marine Anticancer Compounds: The Use of Virtual Screening for the Discovery of Small-Molecule Cancer Drugs](#) [6].

- [Simulaciones moleculares de docking \(acoplamiento molecular\) para buscar potenciales inhibidores de diferentes virus](#) [7].

Source

URL:<https://web.computaex.es/en/noticias/20072017-cenits-colabora-busqueda-anticancerigenos-junto-investigadores-universidad-miguel>

Links

[1] <http://www.mdpi.com/journal/molecules> [2] <https://www.umh.es/> [3] <http://www.cenits.es/cenits/lusitania-II/caracteristicas-lusitania-II> [4] <http://docking.umh.es> [5] <http://www.mdpi.com/1420-3049/22/7/1037> [6] <http://www.cenits.es/enlaces/publicaciones/updated-review-marine-anticancer-compounds-use-virtual-screening-discovery> [7] <http://www.cenits.es/proyectos/simulaciones-moleculares-docking-acoplamiento-molecular-buscar-potenciales-inhibidores>