

Estructuras de iminoazúcares son modeladas por el supercomputador LUSITANIA para el tratamiento de enfermedades

• Tue, 04/09/2012



Los iminoazúcares son derivados de carbohidratos con interesantes propiedades biológicas, ya que a menudo se comportan como potentes inhibidores de glicosidasas. Así, estos derivados están siendo investigados como posibles fármacos para el tratamiento de enfermedades como el cáncer, el SIDA o la diabetes.

El [grupo QUOREX](#) [1] de la [Universidad de Extremadura](#) [2], en colaboración con el [Departamento de Química](#) [3] de la [Universidad de Oxford](#) [4], ha elaborado un estudio en el que se han sintetizado y evaluado biológicamente varios iminoazúcares de gran interés biológico.

El [supercomputador LUSITANIA](#) [5] ha permitido modelizar algunas estructuras con el fin de predecir, en función de la disposición tridimensional de las mismas, el grado de actividad biológica que pueden presentar.

Este estudio ha sido publicado recientemente en la prestigiosa revista internacional [Organic Letters](#) [6].

- [Synthesis from d-Altrose of \(5R,6R,7R,8S\)-5,7-Dihydroxy-8-hydroxymethylconidine and 2,4-Dideoxy-2,4-imino-d-glucitol, Azetidine Analogues of Swainsonine and 1,4-Dideoxy-1,4-imino-d-mannitol](#) [7]

Enlaces de interés:

- [Proyecto QUOREX](#) [8]

Source

URL:<https://web.computaex.es/en/noticias/040912-estructuras-iminoazucare-son-modeladas-supercomputador-lusitania-para-tratamiento-e>

Links

[1] <http://www.unex.es/investigacion/grupos/quorex/> [2] <http://www.unex.es> [3] <http://www.chem.ox.ac.uk/> [4] <http://www.ox.ac.uk/> [5] <https://web.computaex.es/cenits/lusitania> [6] <http://pubs.acs.org/journal/orlef7> [7] <https://web.computaex.es/enlaces/publicaciones/synthesis-d-altrose-5r6r7r8s-57-dihydroxy-8-hydroxymethylconidine-and-24-dideo> [8] <https://web.computaex.es/proyectos/quorex>