

Compuestos fluorescentes como sondas moleculares y agentes antiproliferativos

Objetivo del proyecto

Tiene como objetivo general el diseño y obtención de nuevos compuestos fluorescentes que puedan actuar como agentes antiproliferativos y/o sondas moleculares para el estudio de diferentes procesos biológicos relacionados con la mitosis.

Participantes del proyecto

Universidad de Salamanca, www.usal.es

SCAYLE, Supercomputación Castilla y León (España), www.scayle.es

Ejecución: 2025.

Financiación del proyecto

Ayudas a la investigación de la Fundación Memoria D. Samuel Solórzano Barruso 2024.

Funciones de SCAYLE

Para la investigación se utilizaron métodos computacionales para llevar a cabo la simulación de las interacciones de los ligandos con su sitio de unión en las dianas. Gracias al soporte de SCAYLE, se pudieron realizar cálculos de elevado coste computacional y que no podríamos llevar a cabo de otra forma. Entre ellos, se encuentran las simulaciones de dinámica molecular aceleradas por GPU y los cálculos de química cuántica.

Justificación del proyecto

El cáncer es una de las principales causas de mortalidad en el mundo. Dentro de las diferentes estrategias que se utilizan para su tratamiento destaca la quimioterapia. Y, dentro de ésta, los agentes antimitóticos representan un grupo importantísimo. Los compuestos antimitóticos autorizados para uso clínico presentan numerosos efectos secundarios, principalmente neurotoxicidad, por lo que se hace necesaria la búsqueda de fármacos con un mejor perfil. En este sentido, las

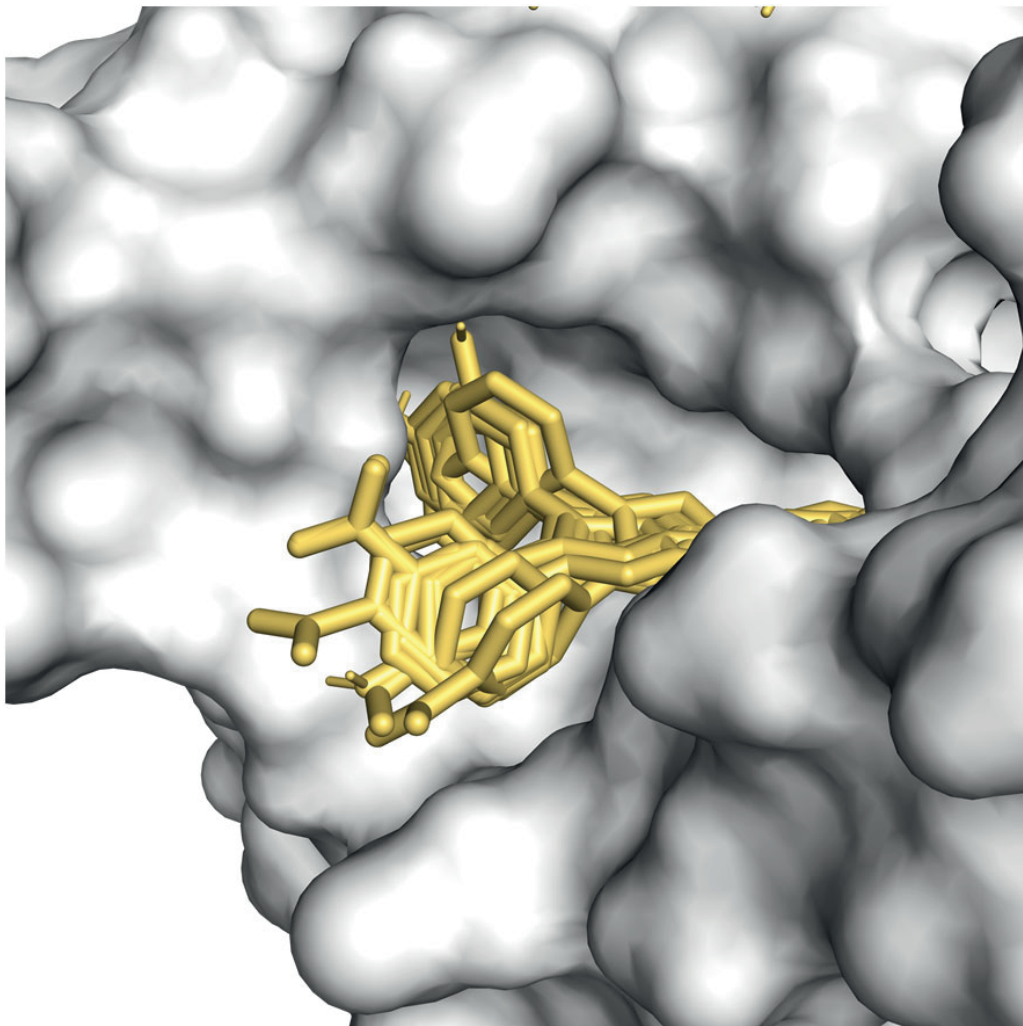
quinasinas mitóticas representan dianas prometedoras para el tratamiento del cáncer. En el proyecto se ha trabajado sobre el diseño, la obtención y la evaluación biológica de nuevos compuestos como inhibidores de quinasinas mitóticas como potenciales agentes antiproliferativos.

Líder del proyecto

Diseño y síntesis de moléculas bioactivas (DYSBIO). (IP: M^a Concepción Pérez Melero)

La investigación que desarrollan en el grupo se centra en el diseño y la obtención, por medio de síntesis orgánica, de nuevos compuestos con actividad biológica. Trabajan principalmente en dos líneas de investigación:

1. Diseño y obtención de compuestos con actividad antiproliferativa, antiparasitaria o antifúngica; en particular, inhibidores de quinasinas mitóticas, fundamentales para el correcto desarrollo de la mitosis.
2. Modificación estructural de compuestos de origen natural en la búsqueda de moléculas con nuevas actividades biológicas. La naturaleza es fuente de multitud de compuestos con diferentes estructuras, muchos de los cuales presentan actividad biológica. La modificación de los mismos permite la obtención de nuevos compuestos con mejores propiedades o actividades diferentes de las originales, constituyendo una vía para la generación de nuevas moléculas bioactivas.



Unión de varios de los compuestos estudiados en el sitio de unión de la quinesina-5 humana.

**FUNDACIÓN MEMORIA DE
D. SAMUEL SOLÓRZANO BARRUSO**



**VNIVERSIDAD
D SALAMANCA**

Referencia: FS/10-2024