

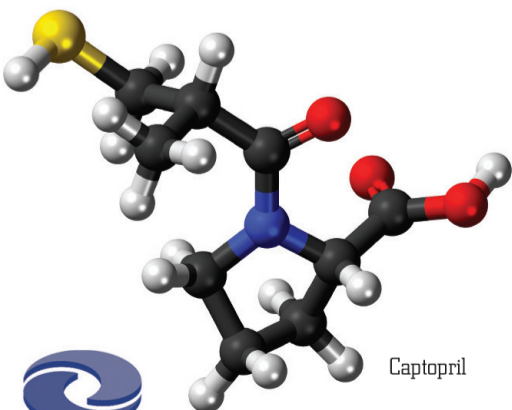


La medicina tradicional atribuye a la jalea real propiedades anticancerígenas. Encontrar, entre todos los componentes de este producto de las abejas reinas, al elemento responsable de la actividad medicinal es casi como buscar una aguja en un pajar. Sin embargo, el acceso a las supercomputadoras cambió la forma de identificar compuestos con potencial farmacológico.

“Antes de que se inventaran las computadoras, cuando un químico quería encontrar un principio activo, sintetizaba en el laboratorio cientos de compuestos; luego los probaba uno por uno para ver cuál de ellos presentaba la actividad buscada. Este método de trabajo no solo requiere mucho mayor esfuerzo humano, también exige una cantidad importante de reactivos y se producen desechos tóxicos” explica el doctor Enrique Ángeles Anguiano, jefe del Laboratorio de Química Medicinal de la Facultad de Estudios Superiores (FES) Cuautitlán de la UNAM.

Con su gran poder de cálculo, las supercomputadoras se unen a la intuición y el talento humano para descubrir nuevos compuestos medicinales. El doctor Ángeles Anguiano, con experiencia en este campo, señaló que en un primer paso, se investigan todos los procesos biológicos asociados a una enfermedad. Con esta información, se encuentra un blanco biológico o blanco molecular con el que se necesita que interactúe el fármaco.

Modelar esta estructura en tres dimensiones permite conocer con precisión el lugar a donde el fármaco deberá llegar e interactuar para surtir efecto cuando se administre. Los químicos de la FES Cuautitlán pueden así diseñar moléculas o compuestos virtuales y hacer en la computadora una simulación de cómo interaccionaría la estructura química del fármaco con el blanco biológico en el cuerpo de una persona. La supercomputadora hace los análisis de familias o grupos de compuestos virtuales, y en menor tiempo, los científicos cuentan no con cientos, sino hasta miles de perfiles de esos compuestos que indican el porcentaje de probabilidad de presentar la actividad farmacológica deseada.



Captopril

¿Cómo se hacen los medicamentos?

Desarrollar un compuesto farmacológico puede tomar más de 20 años. Investigadores mexicanos aceleran el proceso con el uso de supercomputadoras.

“Así ya no sintetizamos todos los compuestos sino únicamente los más prometedores. La ventaja es que el uso de esta tecnología puede disminuir el tiempo de descubrimiento de un compuesto activo hasta 5 años”, destaca el doctor Ángeles Anguiano.

A lo largo de más de 20 años de trabajo, el Laboratorio de Química Medicinal ha logrado integrar una red de investigadores de instituciones como el Centro de Investigación y de Estudios Avanzados (CINVESTAV) del Instituto Politécnico Nacional, la Universidad Autónoma Metropolitana, así como el Instituto de Química, la Facultad de Medicina y la Facultad de Estudios Superiores Cuautitlán de la UNAM, entre otras.

El equipo de cerebros humanos y electrónicos ya ha encontrado compuestos prometedores en el tratamiento del cáncer, la hipertensión y enfermedades causadas por microorganismos como *Helicobacter pylori*. “Este trabajo es fundamental si tenemos en cuenta que el 99 por ciento de los principios activos que se usan en México fueron descubiertos y sintetizados en el extranjero”, reconoce el investigador. Actualmente, se comercializan fármacos diseñados con ayuda de supercomputadoras y cada día habrá un número mayor. Además, hay científicos modelando las estructuras tridimensionales y los blancos moleculares de fármacos, como el captopril, que se obtuvieron en el pasado por otros métodos.

DISEÑO DE FÁRMACOS MEXICANOS ASISTIDO POR COMPUTADORA

La jalea real contiene un compuesto de actividad contra el cáncer hepático, cuyo nombre es éster fenético del ácido caféico. Investigadores de la FES Cuautitlán de la UNAM lograron sintetizar este componente y diseñar otros de origen sintético con mayor actividad que el natural. La patente, en proceso, la comparten la UNAM y el CINVESTAV.



Grupos de investigación europeos encontraron que una fracción de la estructura química de una planta china presentaba efecto antihipertensivo. Los investigadores de la FES Cuautitlán tomaron esa información como fundamento y modificaron la estructura química del compuesto. El análisis por computadora les mostró que las nuevas moléculas tendrían una actividad semejante al producto natural. Desde 2012, los químicos cuentan con el reconocimiento del hallazgo de un compuesto antihipertensivo, llamado provisionalmente UNAMapril. Ya están en pláticas con compañías farmacéuticas para realizar las últimas fases de la investigación que permitan el uso en humanos.

Texto: Naix'eli Castillo / Diseño: Adolfo González

Escríbenos a cienciaunam@unam.mx o llámanos en el D.F. al 5622-7303

