

Dirección de

Investigación & Vinculación con el Medio Ampliar el conocimiento en la Patagonia-Aysén UAysén

Promiscuidad vs Selectividad: una cuestión de drogas

Gabriel Núñez-Vivanco, Departamento Ciencias Naturales y Tecnología

La investigación actual en el desarrollo de medicamentos (drugs) está desafiando el paradigma de la "bala mágica" que busca compuestos altamente selectivos para un solo objetivo. En la práctica, la mayoría de los medicamentos interactúan de manera promiscua con más de un objetivo molecular, lo que antes se consideraba una causa de efectos secundarios no deseados. Sin embargo, ahora se reconoce que esta promiscuidad puede ser una característica deseada. Muchos esfuerzos se centran en diseñar compuestos multiobjetivo, ya que la evidencia muestra que la eficacia clínica se mejora cuando un medicamento se une a varios objetivos, incluso si no estaban originalmente relacionados con la enfermedad.

Una estrategia prometedora es identificar patrones tridimensionales similares entre proteínas involucradas en una enfermedad multifactorial. Esto se logra mediante el análisis de las estructuras proteicas 3D para detectar similitudes en su geometría, fisicoquímica y topología. Esta información se utiliza para construir un "receptóforo" entre múltiples proteínas, que luego se emplea para diseñar ligandos promiscuos pero selectivos.

En resumen, este enfoque disruptivo en el desarrollo de medicamentos busca aprovechar la promiscuidad de los fármacos y utiliza patrones 3D similares que se encuentran en diferentes blancos, a través de estrategias computacionales y farmacológicas.

Palabras clave: Selectividad, Polifarmacología, Patrones 3D, "Receptóforo"

Organizan:





