Universidad de Alcalá

MODELO DE ESTIMACIÓN DE ENERGÍA DE INTERACCIÓN BASADO EN RELACIONES CUANTITATIVAS DE ESTRUCTURA ACTIVIDAD (3D QSAR)

OFERTA TECNOLÓGICA

Código

BIO_UAH_01

Áreas de aplicación

- Ciencias biológicas

Tipo de colaboración

- Coperación técnica
- Acuerdo comercial con asistencia técnica

Investigadores principales

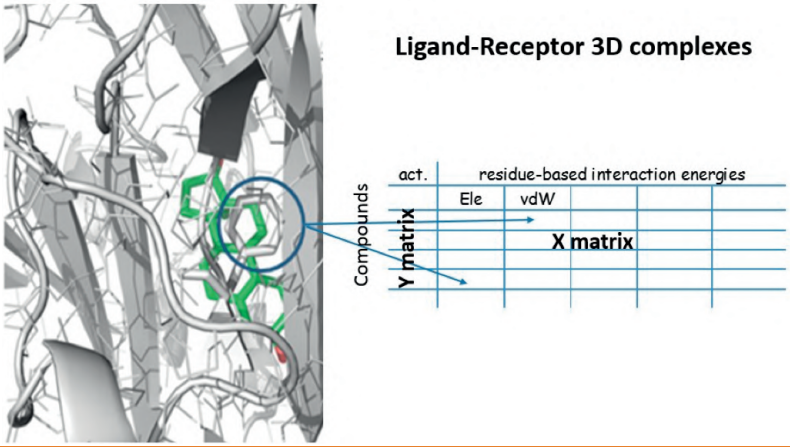
Prof. Federico Gago Bádenas

CONTACTO

OTRI Universidad de Alcalá
Escuela Politécnica Superior
Campus Científico-Tecnológico
28805, Alcalá de Henares
(Madrid)
(+34) 91 885 45 61
otriuah@uah.es

@otriuah

OTRI Universidad de Alcalá



RESUMEN

La actividad biológica de un compuesto depende en gran medida de su energía de interacción con el receptor. Las estimaciones de esta energía de interacción tienen gran importancia para predecir a priori la actividad de compuestos noveles antes de su síntesis. Aunque se conozca su estructura, la interacción es difícil de calcular.
Para resolver problemas con series de compuestos relacionados entre sí, se puede construir un modelo más simple de la energía de interacción y su mecanismo molecular. Este modelo denominado análisis COMBINE (Combine Binding Energy), está fundamentalmente basado en el método 3D QSAR (Quantitative Structure-Activity Relationships) que utiliza estructuras complejas de ligando-receptor. La energía de interacción ligando-receptor, se computeriza en programas de modelaje molecular AMBER. Las contribuciones residuales fueron contempladas con estimaciones de la contribución electrostática de desolvatación de los ligandos y receptores con actividad biológica, usando un método continuo. Todos los valores de energía se relacionan con la actividad biológica gracias al análisis de regresión PLS (Mínimos Cuadrados Parciales).

VENTAJAS Y ASPECTOS INNOVADORES

Poder predecir y valorar la energía de interacción de un compuesto novedoso con su diana biológica con anterioridad a su síntesis, así como la de poder cuantificar las relaciones estructura-actividad en series de análogos. Igualmente, es posible construir, visualizar, y optimizar moléculas con potencial farmacológico y modelar por homología estructuras macromoleculares aún no disponibles experimentalmente.

- Combine Binding Energy (COMBINE) se utiliza para la determinación de los efectos de la incorporación del disolvente.
- Se utiliza como herramienta de diseño de drogas receptoras.
- Permite determinar el cálculo de la contribución electrostática a la energía libre de unión entre un ligando (L) y un receptor para formar el complejo L-R en presencia o ausencia de disolvente.