

Información Empresa

VILLAPHARMA

Responsable



José Manuel Villalgordo Soto

Helena Den Haan

2014/2017

Información General



Grupo de Investigación
BIO-HPC



Programa de Doctorado
Ciencias de la Salud



Director/es Tesis

Horacio Pérez Sánchez
José Manuel Villalgordo Soto
Alfonso Pérez Garrido

Desarrollo de nuevas metodologías para el descubrimiento de compuestos bioactivos y su aplicación a problemas de relevancia biomédica.

Comprender el mecanismo de acción de moléculas bioactivas es una tarea de especial interés en el ámbito científico-práctico dado que, entre otros aspectos, permite proponer cambios en la estructura de un compuesto y optimizar su actividad. Entender como se produce el acoplamiento molecular entre un fármaco y su diana terapéutica es necesario para poder encontrar nuevas moléculas que puedan formar un complejo estable con la proteína y ejercer la misma función que la anterior pero de un modo más eficaz o evitando posibles efectos nocivos asociados al fármaco. Con la ejecución del proyecto se quiere identificar dentro de la librería de compuestos de la empresa algunas moléculas que presenten alta afinidad por una serie de proteínas de relevancia biomédica, tales como p38-MAPK, la fosfatidil inositol 3-OH transferasa o la α -galactosidasa, empleando técnicas de cribado virtual, tales como el modelado del acoplamiento

molecular.