

ESTUDIAN EL COMPORTAMIENTO DEL CISPLATINO Y DERIVADOS

Cómo actúa a escala molecular una familia de antitumorales muy utilizada

Un estudio de la Universidad de Sevilla permite mejorar la comprensión del mecanismo del cisplatino y derivados –unos fármacos antitumorales que se emplean en tratamientos de quimioterapia para varios tipos de cáncer como los tumores de testículos, ovario y pulmón–. El objetivo es hacerlos más eficaces y disminuir sus efectos secundarios.

US

26/6/2015 12:20 CEST



Grupo de Investigación de Físicoquímica de Medios Condensados de la Universidad de Sevilla. / US

Miembros del grupo de investigación Físicoquímica de Medios Condensados modelan la molécula del cisplatino en disolución, un antitumoral que se conoce desde los años 60 y que se emplea en tratamientos de quimioterapia para varios tipos de cáncer, entre los que se incluyen tumores de testículos, ovario y pulmón, así como derivados de este complejo de platino que se forman en el organismo.

Simulan el comportamiento de este compuesto en disolución con el objetivo de modelar cómo se comportarían estos compuestos en medios biológicos

En el estudio, publicado en *Journal of Chemical Theory and Computation*, investigadores de la Universidad de Sevilla (US) simulan el comportamiento de este compuesto en disolución con el objetivo de modelar cómo se comportarían estos compuestos en medios biológicos.

Este tipo de estudios que utilizan de forma masiva recursos computacionales de potentes supercomputadores son representativos de lo que hoy en día viene en llamarse estudios *in silico*, por referencia al material de los ordenadores, frente a los estudios *in vitro* o *in vivo*, que son métodos habituales de investigación en estos campos.

“Los acuo-derivados del cisplatino resultantes de la sustitución de los ligandos cloruro por moléculas de agua desempeñan un papel importante dentro de las células cancerosas en los estadios finales del proceso de destrucción de las mismas”, explica [Enrique Sánchez Marcos](#), catedrático de la US y autor del estudio.

El experto añade que “ser capaces de describir estos derivados en disolución a escala molecular debe abrir la puerta a modelados de las interacciones de estas especies con los distintos constituyentes de la célula”.

La capacidad de describir teóricamente al cisplatino y sus derivados va a permitir continuar los estudios con otros complejos similares de platino, donde algunas de las propiedades dinámicas y reactivas de cara a su eficacia farmacológica puedan mejorarse frente al cisplatino o algunos de los complejos relacionados actualmente en uso.

Estos investigadores del departamento de Química Física aplican técnicas estadísticas y métodos de física cuántica para describir de manera teórica iones metálicos y complejos de ellos en disolución en distintas áreas de la química en disolución.

Referencia bibliográfica:

Andrea Melchior, Marilena Tolazzi, José Manuel Martínez, Rafael R. Pappalardo, and Enrique Sánchez Marcos. "Hydration of Two Cisplatin Aqua-Derivatives Studied by Quantum Mechanics and Molecular Dynamics Simulations". *Journal of Chemical Theory Computation* 11: 1735-1744 (2015)

Derechos: **Creative Commons**

Creative Commons 4.0

Puedes copiar, difundir y transformar los contenidos de SINC. [Lee las condiciones de nuestra licencia](#)