

The logo of the Universitat de Barcelona (UAB) is displayed in white text on a dark brown background.

Codi oficial del grup: 1491
Grup de Recerca Laboratori de Medicina Computacional

Directors del grup de recerca

Nom	Leonardo
Cognoms	Pardo Carrasco
Telèfon	93 581 2797
Email	Leonardo.Pardo@uab.es

Web del grup

Departaments/Instituts/Centres Departament de Pediatria, d'Obstetrícia i Ginecologia i de Medicina Preventiva
als quals s'adscriu el grup
(per ordre alfabètic)

Dades del grup de recerca

Membres integrants del grup i departament al qual pertanyen. S'indica el percentatge de dedicació de cada membre al grup

Campillo Grau, Mercedes - Unitat Departamental de Bellaterra (Departament de Pediatria, d'Obstetrícia i Ginecologia i de Medicina Preventiva) - Dedicació: Parcial

Deupi Corral, Xavier - Departament de Pediatria, d'Obstetrícia i Ginecologia i de Medicina Preventiva - Dedicació: Parcial

Rodríguez Torrecillas, Iván - Unitat Departamental de Bellaterra (Departament de Pediatria, d'Obstetrícia i Ginecologia i de Medicina Preventiva) - Dedicació: Parcial

Doelker, Nicole - Universitat Autònoma de Barcelona - Dedicació: Parcial

Opacic, Jessica - Universitat Autònoma de Barcelona - Dedicació: Parcial

Membres de la UAB: Feu click sobre el nom dels investigadors per consultar la seva producció científica

[Campillo Grau, Mercedes](#)

[Deupi Corral, Xavier](#)

[Rodríguez Torrecillas, Iván](#)

Nom del Grup de recerca

Grup de Recerca Laboratori de Medicina Computacional

Paraules clau del grup

Català

Biologia computacional

Castellà

Bioinformática
Biología Computacional
Modelización molecular

Anglès

Bioinformatics
Computational Biology
Computer assisted drug design
G protein-coupled receptors structure and function
Molecular modeling

Objectius de recerca que configuren la seva raó de ser

El Laboratori de Medicina Computacional (LMC) de la UAB aplica eines bioinformàtiques, com alineament múltiple de seqüència, mètodes estadístics, recerques en bases de dades, gràfics moleculars, 3D-QSAR, i simulacions de dinàmica molecular, (i) per al disseny molecular de lligands i (ii) per a estudiar les relacions estructura-funció de receptors acoblats a PG (RAPG). Els RAPG són la quarta família més nombrosa en el genoma humà amb més de 1000 seqüències i la diana farmacològica del 40% dels fàrmacs usats clínicament. Resum dels mèrits científics (període 2001-2004) Disseny molecular de lligands. El nostre grup d'investigació té una àmplia experiència en disseny molecular assistit per ordinador de nous compostos amb projectes finançats per la Fundació Marató de TV3 (1014/97) i del MCyT PB92-0623, PB95-0624, SAF99-0073 i SAF2004-07103-C02-02. Hem identificat, en col·laboració amb el grup de la Dra. López-Rodríguez del Departament de Química Orgànica de la Universitat Complutense de Madrid, lligands amb afinitat pels RAPG: 5-HT1A (J. Med. Chem., 2001, 44, 198; Mol. Pharmacol., 2002, 62, 15; Bioorg. Med. Chem. Lett., 2003, 13, 1429; J. Med. Chem., 2005, 48, 2548), 5-HT4 (Bioorg. Med. Chem. Lett., 2001, 11, 2807; J. Med. Chem., 2002, 45, 4806; J. Comput.-Aid. Mol. Des., 2003, 17, 515), 5-HT6 (J. Med. Chem., 2005, en premsa), i 5-HT7 (J. Med. Chem., 2003, 46, 5638). Així mateix, hem realitzat estudis de relacions estructura-afinitat en un conjunt de sesquiterpens obtinguts de *Maytenus cuzcoina* (J. Med. Chem., 2004, 47, 576; Curr. Pharm. Des., 2005, en premsa), en col·laboració amb el Dr. Ravelo de l'Institut Universitari de Bio-Orgànica Antonio González de la Universitat de La Laguna. Les tècniques computacionals emprades en el disseny han estat: 3D-QSAR/CoMFA, creació de models de farmacòfors i l'obtenció de models lligant-receptor. Relacions estructura-funció de RAPG. Aquesta línia d'investigació està suportada econòmicament per la MCyT (SAF2