



DOCTORATS  
INDUSTRIALS

EL PLA DE  
DOCTORATS  
INDUSTRIALS

## PROJECTE DE DOCTORAT INDUSTRIAL EXPEDIENT 2015 DI 052

### DADES DE L'EMPRESA I DE L'ENTORN ACADÈMIC

#### Títol del projecte

Alineament de molècules utilitzant descriptors basats en els camps d'interacció

#### Empresa

Pharmacelera SL

#### Responsable de l'empresa

Enric Herrero Abellanas

#### Universitat o Centre de Recerca

Universitat de Barcelona

#### Director/a de tesi

Francisco Javier Luque

#### Treballador/a de l'empresa i doctorand/a

Javier Vazquez Lozano

### BREU DESCRIPCIÓ DEL PROJECTE DE RECERCA

En les fases inicials del disseny de fàrmacs, on s'utilitzen processos computacionals (CADD – Computer-Aided Drug Design) per trobar molècules candidates a esdevenir un medicament, es fan servir models químics simples i menys precisos per satisfer el compromís entre temps de càlcul (cost dels departaments de química computacional) i precisió dels resultats. Incrementar la precisió dels resultats augmenta les probabilitats d'èxit de les molècules candidates en les subsegüents fases del disseny de fàrmacs. Quantificant aquest compromís, incrementar la probabilitat d'èxit de les subsegüents fases en un 1% implicaria un estalvi de 52M d'euros, mentre que reduir el temps d'execució en un 1% implicaria un estalvi de 9M d'euros de projecte de desenvolupament d'un fàrmac (1).

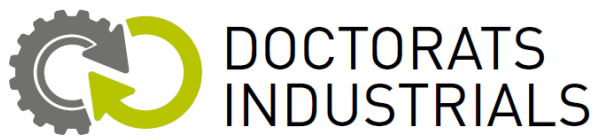
El projecte es centra en proposar i desenvolupar models més precisos i acurats per millorar l'eficiència dels mètodes emprats en identificació de hits. Concretament, el projecte vol incidir en l'alineament de molècules, doncs és una eina molt utilitzada en processos d'anàlisi 3D-QSAR i virtual screening,. En el procés d'alineament de molècules s'utilitzen descriptors moleculars senzills (volum, forma, caràcter electrostàtic o hidrofòbic) a fi que el model pugui ésser utilitzat, per exemple, en el procés de virtual screening, on es comparen centenars de milers de molècules. Una enquesta realitzada per Pharmacelera a químics computacionals de les empreses farmacèutiques més importants (Novartis, Pfizer, Johnson&Johnson, AstraZeneca) demostra que l'alineament de molècules és un problema no resolt (83% dels enquestats) i que hi ha un gran interès per Incorporar aquest tipus de models innovadors (100% dels enquestats).



Generalitat de Catalunya  
Departament d'Empresa i Coneixement  
Secretaria d'Universitats i Recerca



Agència  
de Gestió  
d'Ajuts  
Universitaris  
i de Recerca



# EL PLA DE DOCTORATS INDUSTRIALS

[1] S.M. Paul et al., "How to improve R&D productivity: the pharmaceutical industry's grand challenge- Nature Reviews Drug Discovery 9, 203-214, (March 2010).