

PROJECTE DE DOCTORAT INDUSTRIAL EXPEDIENT 2016 DI 051

DADES DE L'EMPRESA I DE L'ENTORN ACADÈMIC

Títol del projecte

Aproximació computacional i experimental de l'ús terapèutic de les molècules d'origen marí i els seus derivats.

Empresa

Mind the Byte, S.L.

Responsable de l'empresa

Alfons Nonell Canals

Universitat

Universitat de Barcelona

Director/a de tesi

Conxita Avila Escartin

Treballador/a de l'empresa i doctorand/a

Laura Llorach Pares

BREU DESCRIPCIÓ DEL PROJECTE DE RECERCA

Els productes naturals són una font de molècules bioactives que cal seguir explotant. Dins dels productes naturals susceptibles de convertir-se en fàrmacs, són d'especial interès aquells que provenen de l'oceà, ja que es tracta d'una gran font de biodiversitat encara per descobrir. Tot i així, tret de pocs casos d'èxit, l'obtenció dels productes naturals marins, en comparació amb altres tipus de compostos, és molt complicada degut a les dificultats tècniques i als alts costos de les prospeccions per explorar el fons marí.

Tot això, juntament amb les dificultats legislatives i la poca biodisponibilitat d'aquests productes, fa que no sempre sigui possible satisfer la demanda d'un laboratori per realitzar els assajos necessaris per anar passant per les diferents etapes del desenvolupament d'un fàrmac. A més, cal considerar el mal que aquesta explotació directa ocasionaria sobre l'ecosistema marí. El desenvolupament de fàrmacs derivats de molècules marines, en comptes d'utilitzar els compostos marins en sí mateixos, és una prometedora solució. Una altra alternativa, és la de reduir la necessitat d'experiments i per tant, producte utilitzat, a través de les tècniques computacionals. La combinació d'ambdues alternatives planteja un bon escenari per l'avenç científic sostenible, al qual pretenem arribar amb aquest projecte.



EL PLA DE DOCTORATS INDUSTRIALS

La química computacional, dins de la indústria farmacèutica, s'ha convertit en un camp que contribueix en molts aspectes del disseny de fàrmacs, des de la selecció de les molècules candidates, a la identificació i optimització de "leads". En particular, la interacció entre la química computacional i les tècniques experimentals biològiques i químiques és la clau per la millora de les "pipelines" del desenvolupament de fàrmacs, reduint costos i temps de sortida d'un producte al mercat.

Concretament, l'objectiu d'aquest projecte és convertir la biodiversitat marina en fàrmacs que repercuteixin en la millora de la societat. A través de la col·laboració entre Mind the Byte i el grup d'investigació de la Professora Conxita Avila de la Universitat de Barcelona, aplicarem les tècniques computacionals disponibles sobre una quimioteca de molècules marines de la seva propietat, amb mostres d'origen antàrtic. Aquesta regió del planeta, degut a les seves característiques biològiques i geogràfiques, es considera una "mina de biodiversitat" i constantment s'hi estan descobrint noves espècies i molècules marines.

Mitjançant l'ús combinat de computació i tècniques experimentals, s'identificaran aquelles molècules susceptibles de convertir-se en fàrmacs. La selecció es realitzarà segons la patologia contra la qual actuen, en concordança els interessos interns de Mind the Byte i del grup d'investigació de la Prof^a. Avila.

