

FICHA TÉCNICA Enero 2017 2ª edición
Biblioteca de nuevas sulfonamidas para ensayos de anticoagulación

Código de producto

DIS-COM-COAG

Tipo de producto

Biblioteca de compuestos de bajo peso molecular con actividad dirigida a distintas dianas implicadas en la cascada de coagulación. Los compuestos pueden actuar como anticoagulantes sobre alguna de las múltiples proteínas de dicha cascada.

Descripción

Los compuestos han sido diseñados como inhibidores de distintas proteínas implicadas en procesos de coagulación: Trombina (Factor FIIa), Factor X Activado (FXa), Factor de Coagulación VIIa, Tripsina, Factor de Coagulación IX, etc.

Nuestros compuestos forman parte de una colección mucho más amplia fruto de un estudio de diversidad con más de 18.000 moléculas. De ellas, un subgrupo de aproximadamente 500 moléculas es suficientemente diverso y representativo de la colección global.

Las moléculas de la colección presentan propiedades *drug-like*, son de estructura definida y de pureza conocida. La gran mayoría presenta novedad estructural.

Información disponible:

- Caracterización estructural (RMN y/o MS)
- Pureza (HPLC y/o RMN)
- Ficha completa de cada molécula en formato de base de datos ChemFinder: estructura química, peso molecular, nombre IUPAC, pureza, estado físico, etc.

Todos los compuestos se pueden facilitar:

- Individualmente,
- Como subgrupo (selección filtrada según los requerimientos del cliente),
- Como quimioteca o colección global.

Formato de presentación: las moléculas pueden suministrarse como sólidos, aceites o en disolución. Por ejemplo, en disolución de DMSO (dimetilsulfóxido) en microplacas de 96 pocillos a la concentración requerida por el cliente.

Adicionalmente, es posible la preparación de estructuras focalizadas basadas en requerimientos estructurales del cliente.

Ponemos a su disposición el soporte técnico de los científicos de la Plataforma de *Drug Discovery*.

Grado de desarrollo

La metodología de síntesis de este tipo de compuestos está completamente desarrollada y optimizada.

Compuestos disponibles para su entrega inmediata: aproximadamente 200 moléculas. El número de compuestos está actualizándose constantemente, ya que la biblioteca está en desarrollo.

Compuestos de la colección preparados bajo petición: en función del número de compuestos y disponibilidad de *building blocks* el tiempo oscila entre 3 semanas y varios meses (a consultar).

Adicionalmente, existe la posibilidad de realizar una optimización (*hit optimization, lead optimization*) de las estructuras candidatas seleccionadas.

Situación de la propiedad intelectual

- Scaffold tipo 1 (anillo lactámico): US8569507 (B2), EP2445879 (A1)
- Scaffold tipo 2 (anillo pirrolidina): US8455660 (B2), ES2350548 (B1), EP2445870 (A1)
- Scaffold tipo 3 (feniletilsulfonamida): US8809584 (B2), WO2010150206 (A1), ES2352398 (B1)

Aplicaciones

- Descubrimiento de nuevos productos (*Drug Discovery*) en empresas que estén buscando nuevos anticoagulantes.
- Rastreo o *screening* de dianas implicadas en procesos de coagulación.
- Herramientas químicas para validación de dianas terapéuticas.
- Rastreo o *screening* de nuevas actividades farmacológicas.

Ventajas asociadas a su uso

- Novedad estructural para la gran mayoría de las moléculas de la colección.
- Compuestos con características compatibles con los requerimientos de los fármacos (*drug-like*).
- Posibilidad de identificar *hits* o *lead compounds* en I+D de nuevos fármacos anticoagulantes.
- Posibilidad de identificar *hits* en I+D en nuevas actividades farmacológicas.
- Desarrollo sintético robusto: en cualquier momento es posible re-sintetizar o escalar los productos. Por tanto, su provisión está garantizada para las diferentes fases de desarrollo del candidato a fármaco.

Publicaciones

No hay publicaciones disponibles a la fecha.