

FICHA TÉCNICA Enero 2017 2ª edición
Biblioteca de nuevas sulfonamidas como antagonistas
de receptores implicados en procesos inflamatorios

Código de producto

DIS-COM-BRA

Tipo de producto

Biblioteca de compuestos de bajo peso molecular con actividad dirigida a distintos receptores implicados en procesos inflamatorios.

Descripción

Los compuestos han sido diseñados como antagonistas de los receptores B₁ y B₂ de bradiquinina, implicados en procesos inflamatorios que cursan con dolor e inflamación, como por ejemplo: en enfermedades respiratorias (asma, rinitis), artritis, pancreatitis, sepsis, etc.

Nuestros compuestos forman parte de una colección mucho más amplia fruto de un estudio de diversidad con más de 90.000 moléculas. De ellas, un subgrupo de aproximadamente 1.000 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 sujeto a cambios puesto que la biblioteca está actualizándose constantemente.

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 (consultar para más detalles).

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 antiinflamatorios.
- Rastreo o *screening* de receptores implicados en procesos inflamatorios.
- Herramientas químicas para la 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 antiinflamatorios.
- 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

Filizola M, Llorens O, Carteni-Farina M and Perez, JJ. New Insights into the Conformational Requirements of B2 Bradykinin Antagonism. *Bioorg. Med. Chem.*, 1998. **6**, 1491-1500

Abraham, W.M., M. Scuri, and S.G. Farmer, *Peptide and non-peptide bradykinin receptor antagonists: role in allergic airway disease*. *Eur J Pharmacol*, 2006. **533**, 1215-21.