



GRUPO DE I+D

Área de conocimiento

- Química Física
- Química Matemática
- Topología Molecular

Colaboración

- Proyectos en colaboración
- Asesoramiento y consultoría
- Proyectos de I+D bajo demanda
- Formación especializada

Unidad de Diseño de Fármacos y Topología Molecular

La topología molecular permite la caracterización estructural de moléculas mediante índices o descriptores topológicos. Estos índices se emplean en el desarrollo de relaciones cuantitativas estructura-actividad (QSAR) que permiten relacionar las estructuras de los compuestos con sus propiedades y actividades químico-biológicas. Así pues, mediante modelos matemáticos es posible el descubrimiento de nuevas aplicaciones de moléculas conocidas, la predicción de efectos toxicológicos y el diseño de nuevas moléculas con propiedades químicas y farmacológicas deseadas.

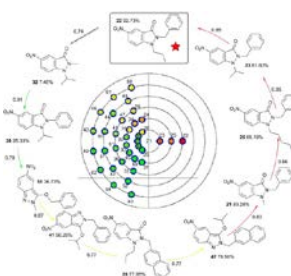


En este ámbito, la actividad investigadora del Grupo de I+D Unidad de Diseño de Fármacos y Topología Molecular, se centra en el **diseño de nuevos compuestos**,

principalmente nuevos fármacos, utilizando descriptores topológicos. El grupo está dirigido por el Dr. Jorge Gálvez Álvarez y está adscrito al Departamento de Química Física de la Universitat de València.

Línea de investigación

Diseño de nuevos compuestos utilizando topología molecular, se usan índices topológicos en sentido inverso al convencional, es decir, en lugar de predecir propiedades de moléculas ya existentes, se trata de generar otras nuevas a partir de propiedades predeterminadas. Se obtiene así una huella dactilar de las moléculas que permite buscar otras nuevas con mejores características.



Campos de aplicación: Las aplicaciones se enmarcan en el diseño de nuevos compuestos y predicciones, usando descriptores topológicos en diferentes **sectores**:

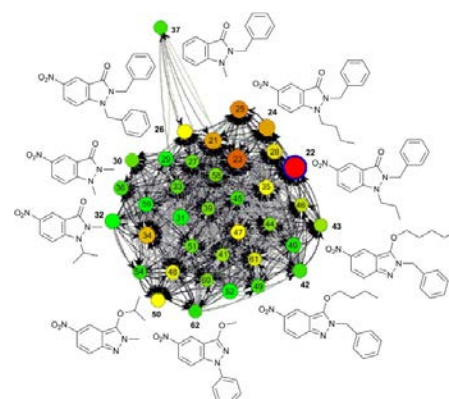


- **salud:** principios activos para el tratamiento del cáncer, Alzheimer, malaria, infecciones, etc.
- **agroalimentación:** nuevos plaguicidas, antioxidantes, aditivos, edulcorantes, colorantes, potenciadores del sabor, etc.
- **materiales:** nuevos semiconductores, superconductores, etc.
- **medioambiente:** métodos de reacción más económicos y sostenibles, predicciones de ecotoxicidad, etc.

Servicios a empresas y otras entidades

Servicios:

- Diseño de nuevos compuestos mediante topología molecular.
- Diseño de métodos de reacción usando topología molecular.
- Predicción de toxicidad de compuestos *in silico*.
- Predicción de efectos secundarios de fármacos *in silico*.



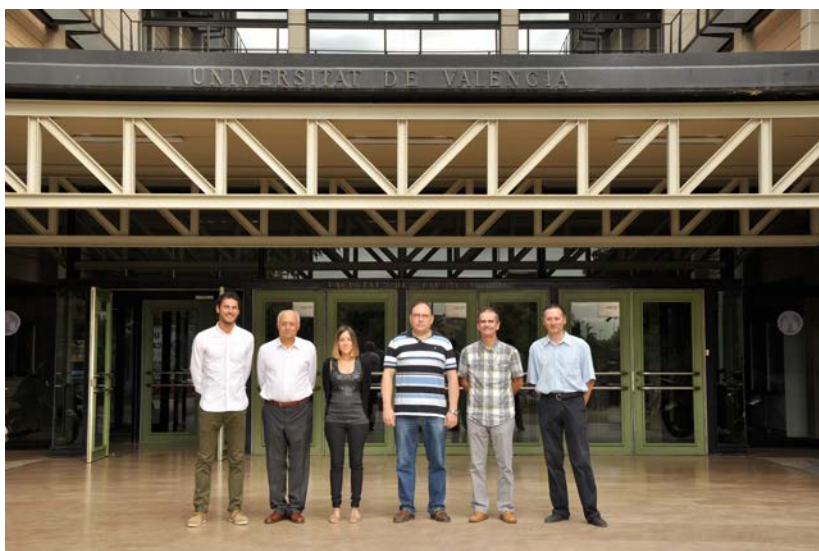
OTRA INFORMACIÓN DE INTERÉS



El Grupo de Unidad de Diseño de Fármacos y Topología Molecular ha realizado el diseño de múltiples compuestos bioactivos, siendo los miembros del grupo inventores de varias **patentes** relacionadas. Las investigaciones se han llevado a cabo a través de **proyectos** propios con financiación pública, y con convenios con **empresas** del sector, permitiendo la adecuada transferencia de los conocimientos, así como su difusión al entorno socioeconómico.

El Dr. Jorge Gálvez es miembro de la Real Sociedad Española de Química, de la Red Española de Química Sostenible, miembro fundador de International Academy of Mathematical Chemistry y académico correspondiente de Medicina de la Comunidad Valenciana.

Los resultados de su actividad investigadora han dado como resultado la **publicación de capítulos de libros** (p.ej. *Molecular topology in QSAR and drug design studies*) que constituyen una referencia obligada en el área de diseño molecular y numerosos **artículos científicos** en revistas internacionales de alto impacto como *Green Chemistry*, *Journal of Medicinal Chemistry*, *Journal of Antimicrobial Chemotherapy*, *Analytical Chemistry*, *Journal of Chemical Information and Modeling*, *Journal of Physical Chemistry C*, *Investigational New Drugs*, *International Journal of Pharmaceutics* y *Journal of Computer-Aided Molecular Design*.



Contacto

Unidad de Diseño de Fármacos y Conectividad Molecular
Departamento de Química Física. Universitat de València

Jorge Gálvez Álvarez
Tel: +34 963544891
E-mail: jorge.galvez@uv.es
