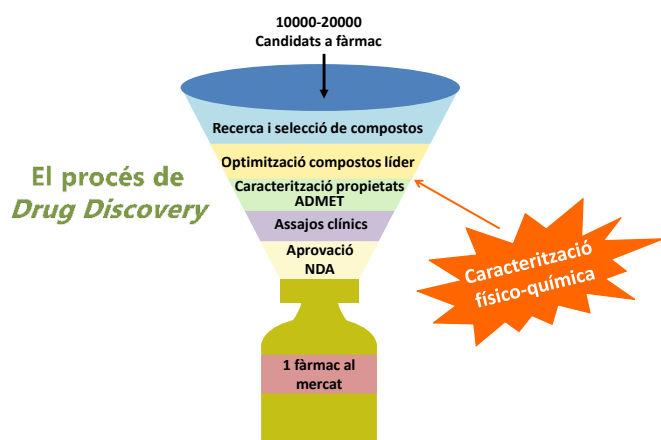
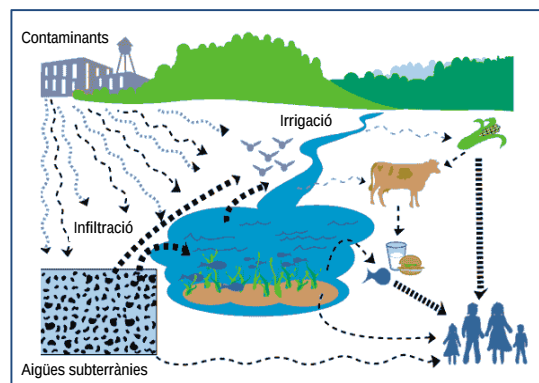


Les línies de recerca del grup es basen, principalment, en l'establiment de metodologia robusta i d'alt nivell d'automatització dirigida fonamentalment a dos camps d'aplicació: la **caracterització de compostos candidats a fàrmac** en les etapes inicials del procés de *Drug Discovery* i la **caracterització de contaminants ambientals**. Les principals tècniques utilitzades són la cromatografia de líquids, l'electroforesi capil·lar i la potenciometria.



Les principals propietats físico-químiques que afecten els paràmetres ADMET i la distribució d'un compost en el medi ambient són la **ionització**, la **lipofilicitat** i la **solubilitat**. Per tant, la mesura o l'estimació d'aquestes propietats físico-químiques és molt important, ja que aporten informació essencial sobre la farmacocinètica i la farmacodinàmica dels candidats a fàrmac i també la distribució ambiental de contaminants.

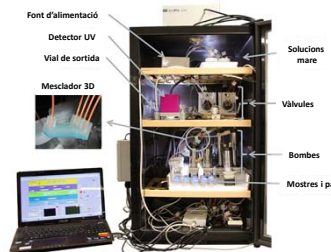


Els paràmetres ADMET (**A**bsorció, **D**istribució, **M**etabolisme, **E**xcreció i **T**oxicitat) estableixen la disposició d'un compost farmacèutic a interaccionar amb l'organisme. Les propietats ADMET tenen una influència directa sobre la farmacocinètica i la concentració de fàrmac en els diferents òrgans, per tant, determinen el rendiment i l'activitat farmacològica del compost.

LÍNIES DE RECERCA

Desenvolupament d'instrumentació específica basada en l'electroforesi capil·lar per a la determinació de constants d'acidesa

L'**electroforesi capil·lar** ofereix una alternativa molt avantatjosa en quant a rapidesa, selectivitat i eficiència respecte als mètodes tradicionals.



Prototip en desenvolupament.

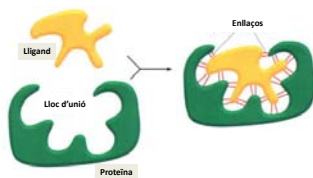
Col·laboració amb l'**Australian Center for Research on Separation Sciences (ACROSS)**. Universitat de Tasmània (Austràlia).

Determinació de constants d'enllaç fàrmac-proteïna (K_b)

La mesura de la constant d'enllaç entre un fàrmac i una proteïna permet saber com són les interaccions entre ells. Actualment es treballa en l'estudi de la interacció de substàncies antioxidants (flavonoids) amb lipoproteïnes (LDL).

Les interaccions fàrmac-proteïna es determinen per **microcalorimetria** i per **electroforesi capil·lar**.

Col·laboració amb el **Departament de Nutrició i Bromatologia**. Facultat de Farmàcia (UB)



Establiment de mètodes per a l'estimació de propietats d'interès ambiental i farmacològic

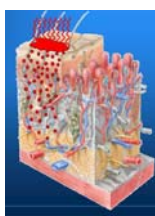
Algunes propietats tant biològiques com ambientals basades en processos de partició es poden emular a partir de sistemes de **cromatografia de líquids** i d'**electroforesi capil·lar** basats en micel·les i/o microemulsions.



S'estableixen metodologies per estimar la toxicitat de contaminants en organismes aquàtics i la permeabilitat de fàrmacs a través de la pell.

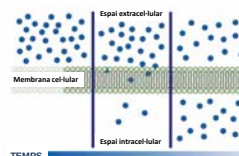


Col·laboració amb **Laboratoris Doctor Esteve S.A.** (Doctorat Industrial)

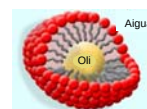


Establiment de mètodes cromatogràfics i electroforètics per a l'estimació de la lipofilicitat

La lipofilicitat es relaciona amb la difusió passiva des del torrent sanguini a la membrana cel·lular. Els mètodes que es desenvolupen es basen en l'**electroforesi capil·lar** amb microemulsions i en la **cromatografia de líquids**.



Els compostos interaccionen amb les microemulsions de forma similar a com ho fan amb les membranes cel·lulars.



Col·laboracions amb les empreses **Almirall S.A.** i **Laboratoris Doctor Esteve S.A.**

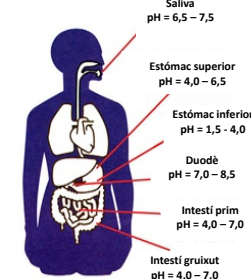
Mesures de la solubilitat de fàrmacs en simuladors de fluids biològics i ús de potenciadors de la solubilitat

La solubilitat dels fàrmacs ionitzables varia en funció del pH de la part de l'organisme on es troben, i això condiciona la seva biodisponibilitat.

L'addició de potenciadors en la formulació dels fàrmacs permet augmentar-ne la solubilitat.

La determinació de la solubilitat es fa **potenciomètricament** i per **shake-flask/ cromatografia de líquids**.

Col·laboració amb l'empresa **Sirius Analytical Instruments Ltd.** (Anglaterra)



COMPETÈNCIES PROFESSIONALS

- ▲ Caracterització de fàrmacs en laboratoris farmacèutics de drug discovery)
- ▲ Caracterització de contaminants en laboratoris químics de control ambiental
- ▲ Disseny d'instrumentació analítica d'electroforesi capil·lar
- ▲ Recerca: doctorat i formació d'investigadors