

Titularidade da Patente: UNIFAL-MG
Número da PI: BR 51 2019 000222-9
Data de Concessão: 19/02/2019
Status: Registro Concedido

PROBLEMA DE MERCADO

O desenvolvimento de um novo fármaco é um processo caro, demorado e sujeito a várias falhas. Na etapa de descoberta, um composto protótipo é selecionado para modular determinada doença. Raramente este composto estará pronto para entrar no mercado como um novo fármaco.

SOLUÇÃO PROPOSTA

O programa MB-Isoster pode ser usado para propor ao químico medicinal quais modificações, baseadas nos conceitos do bioisosterismo, podem ser inseridas no composto protótipo a fim de melhorar seu perfil farmacológico.

DIFERENCIAIS

Construção automática de vários bioisósteros, funcionalidade para calcular energia de interação entre uma molécula e um receptor a fim de selecionar átomos para troca bioisotérica, inclusão de cálculo de propriedades físico-químicas, funcionalidade para realizar virtual screening entre os bioisósteros e um receptor selecionado pelo usuário, disponibilização gratuita.

POTENCIAL DE MERCADO

Química Computacional, Química Medicinal.

ESTÁGIO DE DESENVOLVIMENTO

IDEIA	PROTÓTIPO	MERCADO
LABORATÓRIO	SCALE - UP	