

# Ángel Piñeiro Guillén

*Socio Fundador. Responsable de desarrollo e innovación*

## “S4Sd: investigación fundamental en el área de la asociación molecular”

### Software para la experimentación molecular

*Muchas veces se habla de las dificultades que se encuentran para obtener rendimiento económico a partir del conocimiento generado en los grupos de investigación. S4Sd está cimentada precisamente en investigación surgida de un grupo centrándose en ciencia básica, y los desarrollos planificados dependen directamente del avance en el conocimiento en sus líneas de trabajo.*

#### ¿Cómo surge S4Sd?

S4Sd tiene su origen en un software muy simple que desarrollamos en nuestro grupo de investigación para la simulación por ordenador de experimentos de asociación molecular. Este programa despertó el interés de algunos investigadores, tanto en el sector académico como en compañías farmacéuticas y, siendo conscientes de que teníamos capacidad para desarrollar un software muchísimo más funcional y potente, decidimos trabajar en esa dirección.

#### ¿De qué resultados de investigación partís?

Desde hace más de 10 años nos dedicamos al desarrollo y optimización de modelos teóricos dirigidos al estudio de interacciones moleculares de sistemas complejos. Además de utilizar estos modelos y programas informáticos para nuestro propio trabajo hemos colaborado con un gran número de investigadores tanto locales como a nivel internacional en este tipo de estudios.

A partir de esta experiencia hemos conseguido dar un salto cualitativo en nuestros desarrollos, generalizando familias de modelos completos en lugar de resolver cada modelo de manera individual. Como resultado, en los próximos meses comenzaremos a comercializar un programa computacional que ofrece un número ilimitado de modelos que el propio usuario puede personalizar de manera amigable según sus necesidades.

**“Las aplicaciones tienen lugar en numerosos campos de investigación, prácticamente en todas las áreas de la química, desde fármacos hasta productos de limpieza o cosméticos”**

#### Datos empresariales

**FECHA DE CONSTITUCIÓN:** 2013

**RESPONSABLE:** Angel Piñeiro Guillén

**ACTIVIDAD:** Desarrollo de software para análisis de medidas de asociación molecular

**SECTOR:** Software

#### GRUPO DE INVESTIGACIÓN DEL QUE EMERGE :

Universidad de Santiago de Compostela, Grupo de Materia Blanda y Biofísica Molecular, Departamento de Física Aplicada

## ¿Cuál es el potencial de negocio de la tecnología?

Nuestro software permite a los usuarios sacar el máximo partido de sus equipos de laboratorio, abriendo las puertas a *analizar experimentos* que hasta el momento ni siquiera se realizaban por no poderse analizar de manera apropiada. Cabe señalar que tanto el coste de adquisición como de mantenimiento de estos equipos es generalmente muy elevado, por lo que un software como el que ofrecemos contribuye a optimizar su uso. Además, un análisis apropiado de resultados experimentales permite en ocasiones *ahorrar meses o años de investigación* en el desarrollo de un producto, lo cual tiene una implicación económica muy importante.

Por otro lado, el potencial de crecimiento de nuestro *negocio es virtualmente ilimitado* porque, aunque inicialmente hemos desarrollado un software para el análisis de sólo algunas técnicas de laboratorio, es realmente simple expandirse a otras técnicas y áreas de investigación. De hecho, ya tenemos prototipos de programas de análisis para propiedades diferentes de las que ofrece nuestra plataforma AFFINImeter.

## ¿Sobre qué metodologías y resultados trabajáis?

Estos modelos son básicamente un conjunto de ecuaciones que describen el comportamiento de los sistemas y su resolución requiere del desarrollo de software de cálculo numérico con algoritmos matemáticos muy específicos.

Además cabe señalar, que nuestra plataforma es singular en su formato, ya que no existen otros programas de análisis de medidas de asociación molecular que estén alojados en la nube. Esto permite, por un lado, que el usuario no necesite de ninguna instalación local en su ordenador, tableta o incluso smartphone.

## Datos de contacto

E-MAIL:

TFNO:

WEB:

## Productos / Servicios

### Productos

- AFFINImeter: software para el análisis de medidas de asociación, agregación y disociación molecular

### Servicios

- Caracterizaciones moleculares por medio de varias técnicas experimentales  
- Especialización en ITC y SPR

**“El costo computacional no es realizado por el dispositivo desde el cual accede el cliente, sino por los superordenadores donde alojamos nuestra aplicación”**

**“Contamos con la asesoría especializada del Centro de Supercomputación de Galicia, con quien hemos trabajado durante más de un año en el desarrollo de nuestra plataforma”**

## ¿Hay proyectos que crecen alrededor de esa tecnología?

Actualmente tenemos funcionando una versión alfa de nuestro software con la que algunos investigadores especializados de diferentes centros están ya trabajando.

Estamos utilizando la plataforma de análisis desarrollada en nuestra empresa para nuestro propio trabajo de investigación en el diseño y caracterización de nuevos materiales basados en agregados supramoleculares.