

Identificación del proyecto

NEXT-PANDEMICS

Nombre del proyecto

Desarrollo de nuevas herramientas computacionales para el descubrimiento de fármacos contra las pandemias actuales y futuras

Expediente numero

PID2022-138327OB-I00



Descripción del proyecto

El contexto actual de cambio climático y de concentración de gran cantidad de población en áreas urbanas, unido a la facilidad con que la globalización favorece el movimiento de mercancías y personas, genera un caldo de cultivo idóneo para la aparición de enfermedades infecciosas y su posterior conversión en pandemias que se expanden rápidamente a nivel mundial. La reciente pandemia de COVID-19, que en tres años ha sido la responsable directa de la muerte de más de 6 millones y medio de personas, es un buen ejemplo de esto. Por tanto, es muy importante utilizar todo aquello que hayamos aprendido del COVID-19 para desarrollar nuevas herramientas que nos permitan afrontar las próximas pandemias en mejores condiciones que las actuales. El presente proyecto tiene pues el objetivo de desarrollar nuevas herramientas computacionales que faciliten a la comunidad científica la búsqueda de fármacos antivirales contra las pandemias actuales y futuras de una forma más rápida y efectiva que hasta ahora. Como base de este desarrollo se utilizarán tanto los compuestos que presentan actividad antiviral contra el SARS-CoV-2 como la estructura 3D de los complejos de algunos de ellos con distintas proteínas del propio virus. Para ello, el presente proyecto busca mejorar: (1) la fiabilidad de los resultados proporcionados por el docking proteína/ligando; y (2) la predicción de la bioactividad cuantitativa obtenida a partir de los complejos 3D resultantes de este docking. Además, se implementará una interfaz computacional (denominada NEXT-PANDEMICS) que facilite la aplicación de los resultados del presente proyecto a la hora de buscar antivirales contra nuevas pandemias. NEXT-PANDEMICS utilizará exclusivamente recursos y programas de acceso abierto y se facilitará su descarga desde repositorios públicos para su uso de forma local. Con esto se pretende descentralizar la búsqueda de nuevos antivirales y hacer que sea más rápida y efectiva que hasta el momento. Finalmente, se evaluará la flexibilidad y adaptabilidad de NEXT-PANDEMICS utilizando diferentes dianas farmacológicas: tres del SARS-CoV-2 (la proteasa principal, la proteasa similar a la papaína y la ARN polimerasa dependiente de ARN) y la proteasa NS2B-NS3 tanto del virus del Zika como del virus del Dengue.

Financiación

Entidad financiadora

MCIN/ AEI /10.13039/501100011033/ y por FEDER Una manera de hacer Europa

Importe

231.250,00