

Simulaciones moleculares de docking (acoplamiento molecular) para buscar potenciales inhibidores de diferentes virus

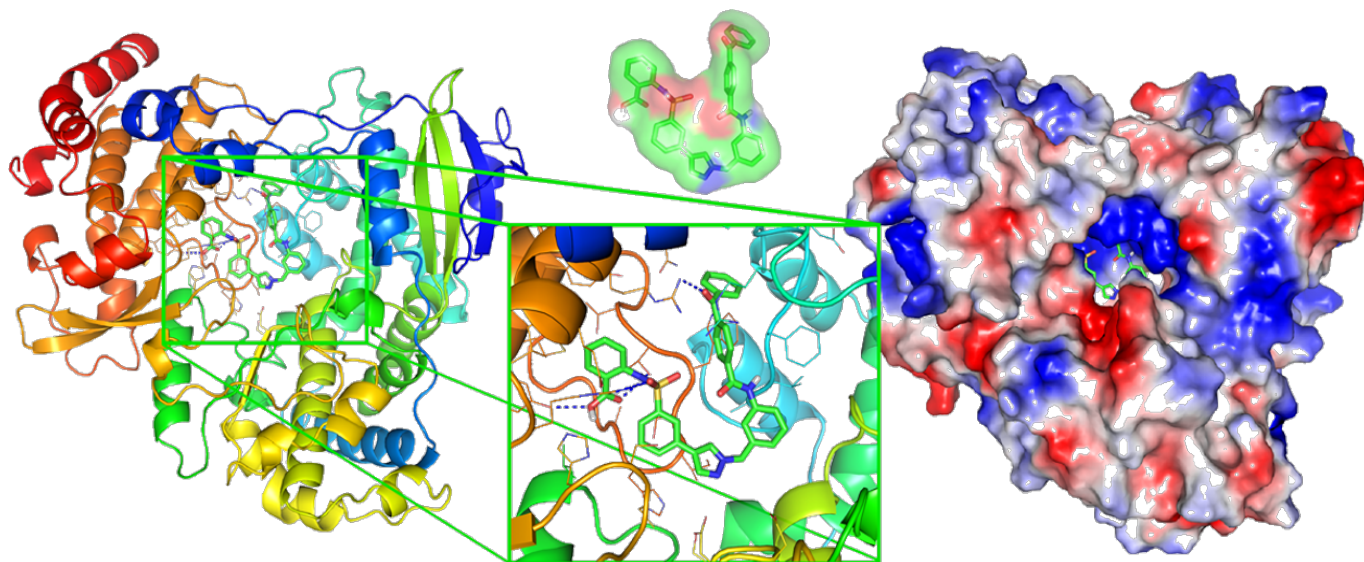
Researchers:

- Vicente Galiano (IP), José Villalaín, Emmanuel Fajardo. Departamento de Física y Arquitectura de Computadores. Universidad Miguel Hernández de Elche.

Language Undefined

Description:

Entre los patógenos que causan las mayores tasas de mortalidad y morbilidad en los seres humanos y los animales podemos nombrar los virus. Sin embargo, en la gran mayoría de los casos, no hay vacunas o tratamientos terapéuticos eficaces. A la familia Flaviviridae de virus pertenecen una serie de patógenos humanos de gran relevancia médica. Virus como el virus de la hepatitis C, el virus de la fiebre amarilla, el virus West Nile, el virus de la encefalitis transmitida por garrapatas, el zika y el dengue pertenecen a esta familia. El dengue (DENV), así como el zika (ZIKV), causan las enfermedades virales transmitidas por artrópodos más frecuentes entre los seres humanos, afectando a millones de personas al año. Estas enfermedades han evolucionado en los últimos tiempos desde una ocurrencia esporádica a un gran problema de salud pública de orden mundial. Es significativo que todos los procesos inherentes al ciclo de replicación viral están directa o indirectamente relacionados con sistemas de membrana o membranas derivadas de ellas. Todo aquello que pueda interferir con cualquiera de estos procesos sería potencialmente útil para que el virus o bien no puede entrar o bien no pueda salir de la célula. Nuestro grupo tiene como objetivo estudiar la estructura y la interacción con diferentes tipos de sistemas modelo de biomembrana de varios dominios de péptidos derivados de las proteínas estructurales y no estructurales de los virus DENV y ZIKV. A partir del conocimiento experimental que tenemos sobre las proteínas estructurales y no estructurales del DENV, nuestros objetivos son el estudio in silico de la dinámica molecular de los péptidos seleccionados de DENV y ZIKV interactuantes con sistemas modelo de biomembranas, la obtención de información exhaustiva sobre su estructura y su interacción específica con los lípidos, la determinación mediante in silico screening y peptide docking con el fin de obtener péptidos antivirales y moléculas bioactivas contra aquellas estructuras obtenidas anteriormente, y en su caso probarlas in vitro para comprobar su efectividad utilizando diferentes composiciones de biomembranas modelo. Todo esto permitirá el desarrollo de nuevos compuestos útiles para la mejora de las terapias combinadas con el fin de lograr el objetivo final, la erradicación de las infecciones virales producidas por DENV y ZIKV.



Journals and conferences:

- Vicente Galiano, Pablo Garcia-Valtanen, Vicente Micol, Jose Antonio Encinar. Looking for inhibitors of the dengue virus NS 5 RNA-dependent RNA-polymerase using a molecular docking approach. Drug Design, Development and Therapy. Volume 2016:10 Pages 3163-3181. DOI: <https://dx.doi.org/10.2147/DDDT.S117369> [1]

Source

URL: <https://web.computaex.es/en/proyectos/simulaciones-moleculares-docking-acoplamiento-molecular-buscar-potenciales-inhibidores>

Links

[1] <https://dx.doi.org/10.2147/DDDT.S117369>