

Seminario de Química Orgánica

Miércoles 05 de octubre de 2022, 13 h

AULA VIRTUAL DQO: <https://zoom.us/my/qo.aula01> - Clave: exactas20

AULA SEMINARIO DQO - 3º piso - PAB. II - CIUDAD UNIVERSITARIA

“Descubrimiento de un inhibidor potente y selectivo de la proteína de la envoltura del virus chikungunya a través del diseño de fármacos asistido por computadora”.

Dra. Mariela Bollini

Centro de Investigaciones en Bionanociencias del CONICET

El virus chikungunya es un virus transmitido por mosquitos Aedes spp. que se ha expandido a nivel mundial en áreas tropicales y subtropicales en los últimos 15 años. La terapia actual para los pacientes se limita a un tratamiento de los síntomas para mitigar la inflamación y el dolor que causa la infección viral. Nuestro grupo de trabajo se concentró en las proteínas E1 y E2 de la envoltura del virus, que median la entrada a las células del huésped. A partir de análisis bioinformáticos identificamos sitios en las proteínas donde se pueden unir moléculas para ejercer una acción farmacológica. Luego, se llevó a cabo un screening virtual de compuestos comerciales e identificamos un candidato que, en estudios en células en cultivo inhibe cerca del 100% de la replicación del virus. Asimismo, combinando ensayos de virología clásica y molecular comprobamos que esta molécula bloquea de forma específica la entrada de chikungunya a la célula huésped actuando sobre las proteínas de envoltura, lo cual es consistente con el blanco terapéutico propuesto. Actualmente, estamos llevando a cabo ensayos pre-clínicos in vitro e in vivo, con el objetivo de lograr una formulación con eficacia y seguridad aprobada para avanzar hacia los ensayos preclínicos con normas de buenas prácticas de laboratorio (GLP).