

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 – 3° 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).