

VITRINE TECNOLÓGICA COVID-19 DO IOC

Oportunidades de parceria
junto ao Instituto Oswaldo Cruz

BUSCANDO NOVOS INIBIDORES POTENTES DE ENZIMAS DE SARS-COV-2 ATRAVÉS DE *DEEP LEARNING*, MODELAGEM MOLECULAR E ESTUDOS IN VITRO (CÓD. 2020.017)

COORDENADOR

Floriano Paes Silva Junior

ÁREA DE PESQUISA

Novos Fármacos

ESTÁGIO DE DESENVOLVIMENTO

Nível 1 - TRL - Princípios básicos observados e reportados. MRL - Princípios básicos observados e reportados.

PROBLEMA / APLICAÇÃO

Novos compostos ou fármacos reposicionados contra enzimas de SARS-CoV-2 ainda são muito escassos e apresentam potências inibitórias discretas, sendo necessária a busca urgente de ligantes mais potentes para este alvo.

INOVAÇÃO

Aplicação de uma plataforma de inteligência artificial (IA) desenvolvida sob medida com base no aprendizado de máquina (*deep learning*), para identificar estruturas moleculares inéditas dentro do espaço biológico dos inibidores ativos de enzimas de SARS-CoV-2. Tais modelos permitem reduzir o tempo e o consumo de recursos de laboratório para encontrar moléculas candidatas inéditas e com potencial atividade sobre o alvo biológico.

OPORTUNIDADE

Fornecer novos compostos com comprovação de eficácia in vitro, com uma base sólida para o mecanismo de ação e uma rota para alta potência, obtendo um conjunto de ativos químicos essenciais para pesquisas pré-clínicas e clínicas necessárias no controle da pandemia de COVID-19.

CONTATO

nit@ioc.fiocruz.br