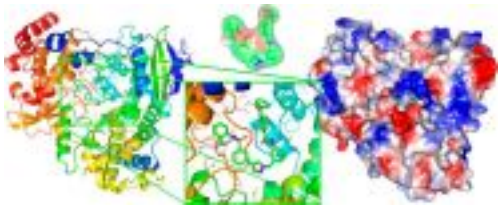
Investigadores de la Universidad Miguel Hernández de Elche y el Centro CénitS colaboran en la búsqueda de inhibidores contra el virus del Dengue

- Wed, 02/11/2016



Un estudio sobre la búsqueda de nuevos inhibidores contra el virus del Dengue, ha sido publicado en la prestigiosa revista Drug Design, Development and Therapy [1], por investigadores de la Universidad Miguel Hernández de Elche [2], utilizando métodos de predicción molecular (acoplamiento molecular o Docking) gracias al Supercomputador LUSITANIA II [3].

El virus del Dengue (DENV), de la familia Flaviviridae y que puede transmitirse de los animales a los humanos a través de artrópodos, como garrapatas y mosquitos, supone un riesgo para la salud humana. Por ejemplo, en 2013 causó entre 40 y 58 millones de infecciones sintomáticas, incluyendo 13.586 casos mortales. Sin embargo, a pesar de su enorme impacto en la salud pública, aún no se han desarrollado terapias antivirales eficaces sobre el DENV y otros flavivirus, ni existen medicamentos para el tratamiento de sus infecciones, habiendo crecido rápidamente su incidencia y estimándose que actualmente existe riesgo de infección para la mitad de la población humana.

Concretamente, el presente estudio tuvo como objetivo la búsqueda de nuevos inhibidores de la ARN polimerasa dependiente de ARN NS5 de los cuatro serotipos de DENV, utilizando una biblioteca química para llevar a cabo experimentos de acoplamiento molecular, aplicando posteriormente filtros de selección adicionales que llevaron a la identificación de compuestos candidatos que, potencialmente, podrían actuar como inhibidores de la polimerasa DENV, eficaces in vitro e in vivo. En la web http://docking.umh.es [4], creada por estos investigadores, se encuentran disponibles los datos primarios de los experimentos de acoplamiento moleculares de las diferentes proteínas y bibliotecas químicas evaluadas.

Estos trabajos de modelado, que han permitido identificar 39 compuestos entre más de 325.319 (reduciendo a un 0,012% el número de compuestos interesantes), han sido realizados utilizando LUSITANIA II, en un trabajo que abre el camino a otros investigadores, exponiendo un conjunto delimitado de resultados para ser evaluados, que permitirán acercar y posibilitar la creación de una vacuna contra el virus del Dengue.

Más información:

- Looking for inhibitors of the dengue virus NS5 RNA-dependent RNA-polymerase using a molecular docking approach [5].
- Simulaciones moleculares de docking (acoplamiento molecular) para buscar potenciales inhibidores de diferentes virus [6].

Artículo:

- 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 [7]

Noticias relacionadas:

- La capacidad de cálculo de supercomputador Lusitania II contribuye al desarrollo de la primera vacuna contra el dengue. [Junta de Extremadura [8]] [Extremadura.com [9]] [Región Digital [10]] [Digital Extremadura [11]]
- El supercomputador extremeño Lusitania II contribuye al desarrollo de la vacuna contra el dengue. [El Periódico Extremadura [12]] [La crónica de Badajoz [13]]
- El ordenador Lusitania II ayuda a conseguir la primera vacuna contra el dengue. [Diario Hoy [14]]

Source URL:https://www.cenits.es/en/noticias/02112016-investigadores-universidad-miguel-hernandez-elche-centro-cenits-colaboran-busqueda

Links
[1] https://www.dovepress.com/drug-design-development-and-therapy-journal [2] http://atc.umh.es/gatcom/ [3] http://www.cenits.es/cenits/lusitania-II/caracteristicas-lusitania-II [4] http://docking.umh.es [5] http://www.cenits.es/enlaces/publicaciones/looking-inhibitors-dengue-virus-ns5-rna-dependent-rna-polymerase-using [6] http://www.cenits.es/proyectos/simulaciones-moleculares-docking-acoplamiento-molecular-buscar-potenciales-inhibidores [7] https://dx.doi.org/10.2147/DDDT.S117369 [8] http://www.gobex.es/comunicacion/noticia&idPub=20439 [9] http://www.extremadura.com/noticias/2016/11/08/la-capacidad-de-calculo-de-supercomputador-lusitania-ii-contribuye-al-desarrollo-de-la-primera-vacuna-contra-el-dengue [10] http://www.regiondigital.com/noticias/tecnologia/262909-la-capacidad-de-calculo-de-supercomputador-lusitania-ii-contribuye-al-desarrollo-de-la-primera-vacuna-contra-el-dengue.html [11] http://digitalextremadura.com/not/81663/la-capacidad-de-calculo-de-supercomputador-lusitania-ii-contribuye-al-desarrollo-de-la-primera-vacuna-contra-el-dengue/ [12] http://www.elperiodicoextremadura.com/noticias/extremadura/supercomputador-extremeno-lusitania-ii-contribuye-desarrollo-vacuna-dengue_975395.html [13] http://www.lacronicabadajoz.com/noticias/extremadura/supercomputador-extremeno-lusitania-ii-contribuye-desarrollo-vacuna-dengue_239327.html [14] http://www.hoy.es/extremadura/201611/09/ordenador-lusitania-ayuda-conseguir-20161109002958-v.html