

Acoplamiento molecular SARS-CoV-2 proteína E

María Isabel Iñiguez Luna

Centro de Investigaciones Cerebrales

1 Acoplamiento molecular

2 SARS-CoV-2

3 Estrategias preventivas

4 Planteamiento del problema

"Los análisis in silico de acoplamiento molecular (AM), permite predecir la estructura más probable entre un ligante y el sitio de unión de una enzima específica, y así establecer una conjetura con base en la energía libre de unión de las conformaciones energéticamente más favorecidas o estables, es decir, aquellas que requieren del menor gasto energético y son más probables a ocurrir.."

- Los estudios encaminados a los coronavirus (CoV), han cobrado interés primario en el campo de la investigación para ampliar rápidamente los conocimientos científicos sobre el nuevo virus COVID-19, responsable actual del brote de la enfermedad por coronavirus (OMS, 2021) con la intención preservar la salud y prevenir la propagación del brote .
- Las principales proteínas blanco en las investigaciones actuales, son la proteína S (pico), y E (envoltura) del coronavirus.

- Un enfoque prometedor para la prevención, son el diseño de las vacunas vivas atenuadas, y algunas de estas vacunas son dirigidas a la proteína de la envoltura (E), que es una pequeña proteína de membrana que forma canales iónicos (Surya et al., 2018).

- Identificar la secuencia que codifica a la proteína de envoltura (E) del coronavirus SARS-CoV-2, a partir de la secuencia completa del genoma (NCBI) y evaluar mediante el análisis de acoplamiento molecular (Autodock) si la amantadina es un ligante con potencial farmacológico.