

| | |
|------------------------------|---|
| SPOKE | Spoke 2 -Health, Food and Lifestyles |
| Acronimo Progetto: | REVERT |
| Titolo Progetto: | Scoperta in silico di piccole molecole come inibitori innovativi per contrastare la resistenza ai farmaci antitumorali |
| Key-words | Farmaco Inibitore Resistenza tumorale Screening virtuale Modellistica molecolare Intelligenza artificiale Farmacodinamica Farmacocinetica Tossicità ADME Automazione |
| Tipologia di impresa | 2 partners: 1 MPI e 1 Università |
| Durata | 12 Mesi |
| Costi totali progetto: | 245.000,00 € |
| Contributo totale richiesto: | 198.708,9 € |
| Abstract | <p>La resistenza ai farmaci antitumorali rappresenta una sfida significativa nel trattamento del cancro, rendendo necessario lo sviluppo di nuove strategie terapeutiche. In questo contesto, l'idea alla base della ricerca proposta è lo sviluppo di nuovi farmaci per combattere vari tipi di tumori inibendo un nuovo fattore di resistenza.</p> <p>Impiegheremo metodi computazionali all'avanguardia (inclusi algoritmi di intelligenza artificiale) per identificare potenziali inibitori in grado di invertire la resistenza tumorale. Inizieremo con l'acquisizione e la cura dei dati chimici e biologici disponibili (WPI), fondamentali per le successive fasi della ricerca. Svilupperemo una pipeline automatizzata per ottimizzare la creazione di librerie chimiche ultra-grandi e di alta qualità da sottoporre a virtual screening (WP2). Esamineremo milioni di piccole molecole per identificare potenziali ligandi che colpiscono il fattore di resistenza. Per accelerare questa fase, creeremo una seconda pipeline per prioritizzare i composti in modo efficiente basandosi sull'affinità di legame predetta. Gli hits virtuali verranno sottoposti a valutazione in silico/in vitro dei profili tossicologici, proprietà chimico-fisiche, e caratteristiche di assorbimento, distribuzione, metabolismo ed escrezione (ADME) (WP3). Almeno 100 composti candidati, potenzialmente con proprietà farmacocinetiche ottimali e la capacità di inibire il fattore di resistenza, saranno infine selezionati e reperiti.</p> |
| TRL iniziale: | 3 |
| TRL finale: | 7 |