

Responsable: Dr. Jesús Armando Luján Montelongo

Ubicación: Laboratorio 14 del Departamento de Química

Título: Síntesis y Evaluación de Antivirales contra Coronavirus

La reciente pandemia de Covid-19, causada por el virus SARS-CoV-2, ha resaltado la urgente necesidad de desarrollar nuevos antivirales. Este proyecto se centra en la síntesis y evaluación *in silico* de nuevos compuestos antivirales contra SARS-CoV-2. Utilizando un enfoque de reposicionamiento de fármacos, nuestro objetivo es diseñar y sintetizar análogos de una molécula líder, evaluando su interacción con la proteína Mpro del virus.

Los objetivos específicos incluyen la modelación molecular para predecir la interacción de los nuevos compuestos con la estructura de Mpro. Se establecerán los parámetros ADME-T (Absorción, Distribución, Metabolismo, Excreción y Toxicidad) de los compuestos sintetizados, comparándolos con los de la molécula modelo.

La metodología se divide en tres partes: síntesis química, estudios computacionales y, opcionalmente, evaluación biológica. La síntesis química se realizará mediante una estrategia de olefinación desarrollada en el grupo de investigación, mientras que la evaluación computacional incluirá modelado molecular y análisis farmacocinético.

Se invitan estudiantes interesados en la química sintética y computacional a unirse a este proyecto para contribuir al desarrollo de potenciales tratamientos contra SARS-CoV-2.