

## [ISCIIC\\_COVID\\_VGuallar: Diseño de antivirales para SARS basados en polifarmacología](#)

### Description

Es esencial diseñar antivirales capaces de inhibir, a la vez, diversos coronavirus, introduciendo así una serie de moléculas que puedan actuar como primera línea de choque en mutaciones de SARS-CoV-2 y en las pandemia venideras. Para ello, es imprescindible localizar dianas con alta similitud, bien caracterizadas estructuralmente, y realizar un cribado virtual de millones de compuestos, tarea que es sólo posible con el uso masivo de supercomputación. Con este objetivo, hemos formado un equipo con amplia experiencia en desarrollo y aplicación masiva de software en estudios farmacológicos, así com en síntesis química y química medica. Los compuestos seleccionados y sintetizados se probarán en diferentes proyectos ya en marcha (a los que cederemos las moléculas): el consorcio Grifols-Irsicaixa y el centro nacional sincrotrón del Reino Unido, Diamond.

Barcelona Supercomputing Center - Centro Nacional de Supercomputación

---

**Source URL (retrieved on 19 Oct 2024 - 09:37):** <https://www.bsc.es/es/research-and-development/projects/isciicovidvguallar-dise%C3%B1o-de-antivirales-para-sars-basados-en>