

PROCESSO PARA OTIMIZAÇÃO DE PEPTÍDEOS COM ESPECIFICIDADE DE LIGAÇÃO, PEPTÍDEOS E USOS

DESCRIÇÃO

Processo para otimização de peptídeos capazes de interagir especificamente com proteínas alvo e seus usos utilizando um algoritmo genético (POTTER) , realiza mutações aleatórias sistemáticas, e, em seguida, realiza o docking proteína-peptídeo e simulações de Dinâmica Molecular, sugerindo o design de peptídeos capazes de interagir especificamente com a estrutura da proteína de interesse, com o objetivo de causar efeitos inibitórios. O processo proposto permitiu o design e a seleção de peptídeos capazes de interagir com a região de ligação com o receptor (RBD) da proteína Spike de SARS-CoV-2.

ESTÁGIO DE DESENVOLVIMENTO

A tecnologia foi classificada em TRL 4.

INVENTORES

Ana Paula de Abreu

Adriano de Paula Sabino

Raquel Cardoso de Melo Minardi

Diego César Batista Mariano

Frederico Chaves Carvalho

VANTAGENS

- Possibilita a investigação de uma ampla gama de mutações.
- Ao utilizar critérios de avaliação como ocupação e contatos, gerando soluções que vão além dos compostos conhecidos.
- A ferramenta amplia o espaço combinatório por meio de mutações direcionadas, que resultam em novos peptídeos diversificados.

DEPÓSITO NO INPI: BR1020250064170
TITULARIDADE: UFMG