

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