**Código:** 20988/PI/18

**Título:** Descubrimiento y optimización de compuestos bioactivos mediante técnicas avanzadas de química computacional.

**Investigador Principal:** Horacio Perez Sanchez

**Importe concedido:** 62.000€

**Financiador:** FUNDACIÓN SÉNECA

**Equipo investigador:**

Josefina Maria Vegara Meseguer

Alfonso Pérez Garrido

Mª Encarnación Martinez Moreno

Jorge de la Peña Garcia

Sara Maria Martínez Sánchez

**Fecha inicio:** 01-04-2019

**Fecha fin:** 31-03-2022

**Palabras claves:** No tiene

**Resumen:** Uno de los retos más importantes actualmente en el campo de la salud y seguridad social es el relativo al descubrimiento de nuevos compuestos bioactivos para problemas de relevancia farmacológica o donde los compuestos conocidos previamente no son lo suficientemente efectivos. Tradicionalmente ha sido la industria farmacéutica quien se ha ocupado del estudio de dichos problemas, debido al gran coste económico que implica y a sus dificultades técnicas. Sin embargo, desde hace unas dos décadas existen metodologías basadas en la química computacional que permiten acelerar dichos descubrimientos, y que pueden ser desarrolladas de manera eficiente en un entorno académico a un coste menor. El solicitante de este proyecto ya ha demostrado la factibilidad de estas técnicas, al aplicar un proceso de investigación multidisciplinar (química, biología, informática) con la explotación de arquitecturas computacionales paralelas de alto rendimiento (GPUs) y supercomputadores. No obstante, tanto esta metodología como otras usadas por una gran cantidad de investigadores todavía presentan una serie de limitaciones a nivel de capacidad predictiva y de velocidad de proceso de datos, dos factores de extrema relevancia para poder llevar a cabo con éxito este tipo de proyectos. El solicitante ha identificado limitaciones relevantes en dichos métodos y propone en este proyecto cómo solucionarlas, partiendo principalmente de resultados previos propios. Las mejoras tanto en velocidad como de calidad predictiva desarrolladas en este proyecto se aplicarán al mismo tiempo a diversos contextos de relevancia farmacológica donde el solicitante ya ha descubierto y en algunos casos patentado, compuestos candidatos a fármacos, y donde se espera que estas contribuya al descubrimiento de nuevos compuestos bioactivos. Por último, todas las mejoras metodológicas obtenidas se implementarán en paquetes software y en un servidor web de fácil uso, para que sean accesibles a toda la comunidad científica.