

“PROJETOS DE PESQUISA”

Título do Projeto

Estudo da interação entre nanopartículas de prata e o vírus SARS-CoV-2 para produção de Equipamento de Proteção Individual com atividade antiviral

Nome do Coordenador

Rafael Alves Allão Cassaro

Nome dos integrantes da equipe

Giordano Poneti (coordenador), Tamyres Bernardo De Souza(mestranda)

Resumo do Projeto (máximo 1500 caracteres)

Esse projeto visa sintetizar e caracterizar nanopartículas de prata metálica (AgNP) e avaliar a sua capacidade de redução de infectividade do Coronavírus SARS-CoV-2, agente causador da COVID-19. As propriedades estruturais e eletrônicas das nanopartículas (NPs) serão caracterizadas por técnicas espectroscópicas de absorção na região do infravermelho, ultravioleta-visível, por difração de raios-X de policristal e por microscopia eletrônica de transmissão. O estudo das propriedades antivirais em relação ao COVID-19 será realizado in vitro, avaliando o efeito do tamanho médio das nanopartículas. Após da individuação das nanopartículas mais eficientes, será avaliado o efeito da redução de infectividade do vírus em Equipamentos de Proteção Individual (máscaras, luvas e jalecos) recobertos com as nanopartículas.

Caso tenha algum financiamento, especificar o tipo

Observações

Título do Projeto

RMN-Rio - Rede em Biologia estrutural: Prospecção de novas drogas para o coronavírus

Nome do Coordenador

Prof. Fábio Ceneviva Lacerda de Almeida (IBqM/UFRJ)

Nome dos integrantes da equipe

Profa. Ana Paula Valente (IBqM/UFRJ); Prof. Anderson de Sá Pinheiro (IQ/UFRJ); Profa. Cristiane Dinis Ano Bom (IQ/UFRJ); Prof. Marcius da Silva Almeida (IBqM/UFRJ); Profa. Gisele Cardoso Amorim (UFRJ-Duque de Caxias); Dr. Francisco Gomes Neto (FIOCRUZ); Dr. Ícaro Putinhon Caruso (UNESP-S. José do Rio Preto)

Resumo do Projeto (máximo 1500 caracteres)

A partir do projeto Pensa Rio, aprovado em 2014, foi formada a rede RMN-Rio, composta por todos os grupos de pesquisa em RMN de proteínas do Estado do Rio de Janeiro. Os objetivos da rede são: (i) melhorar a infraestrutura dos laboratórios; (ii) construir infraestrutura de triagem de fármacos por RMN; (iii) contribuir para biologia molecular estrutural de importantes problemas biológicos e biotecnológicos. Neste projeto, pretendemos utilizar a base já formada da rede RMN-Rio para estudar duas proteínas fundamentais dos betacoronavirus humanos que são possíveis alvos para estratégias terapêuticas: a proteína nucleocapsídica (N) e a proteína Spike (S). A proteína S é fundamental para a interação do vírus com o receptor celular, fusão com a membrana celular e interação com a matriz extracelular. Estudaremos a interação da proteína S, em seus domínios galectina e RBD, com polissacarídeos da matriz extracelular. Estas interações tem o potencial de regular a entrada do vírus na célula hospedeira. Estudaremos também a interação da proteína N com as sequências reguladoras de transcrição (TRSs) e a cauda poli(A) do RNA genômico. As regiões TRS líder (TRS-L) e corpo (TRS-B) regulam o processo de transcrição descontínuo dos coronavírus (subgenomas). A proteína N tem o papel de catalisar a transcrição dos subgenomas, favorecendo a desnaturação da dupla hélice do RNA e, com isso, a transferência de pareamento da fita de RNA complementar senso negativo do TRS-B para o TRS-L. Neste projeto, utilizaremos a Ressonância Magnética Nuclear, entre outros métodos biofísicos e computacionais para entender o reconhecimento molecular, aspectos dinâmicos e estruturais destas proteínas e seus complexos. A triagem de compostos ligantes será feita computacionalmente e experimentalmente por RMN e anisotropia de fluorescência. Cabe mencionar que a Rede RMN-Rio é membro e conta com a colaboração do consórcio internacional COVID19-NMR (<https://covid19-nmr.de/>), que tem como objetivo a caracterização estrutural e a identificação de potenciais ligantes para todas as proteínas e segmentos de RNA não-traduzidos de SARS-Cov-2.

Caso tenha algum financiamento, especificar o tipo

FAPERJ

Observações

Título do Projeto

Estudo da interação entre nanopartículas de prata e o vírus SARS-CoV-2 para produção de Equipamento de Proteção Individual com atividade antiviral

Nome do Coordenador

Giordano Poneti

Nome dos integrantes da equipe

Rafael Alves Allão Cassaro (co-orientador)

Tamyres Bernardo de Souza (mestranda)

Resumo do Projeto (máximo 1500 caracteres)

Esse projeto visa sintetizar e caracterizar nanopartículas de prata metálica (AgNP) e avaliar a sua capacidade de redução de infectividade do Coronavírus SARS-CoV-2, agente causador da COVID-19. As propriedades estruturais e eletrônicas das nanopartículas (NPs) serão caracterizadas por técnicas espectroscópicas de absorção na região do infravermelho, ultravioleta-visível, por difração de raios-X de policristal e por microscopia eletrônica de transmissão. O estudo das propriedades antivirais em relação ao COVID-19 será realizado in vitro, avaliando o efeito do tamanho médio das nanopartículas. Após da individuação das nanopartículas mais eficientes, será avaliado o efeito da redução de infectividade do vírus em Equipamentos de Proteção Individual (máscaras, luvas e jalecos) recobertos com as nanopartículas.

Caso tenha algum financiamento, especificar o tipo

Bolsa Mestrado CAPES

Observações

Título do Projeto

Estudo de marcadores genéticos e do perfil proteômico do plasma sanguíneo de pacientes e sua associação com formas graves da COVID-19

Nome do Coordenador

Luciana Pizzatti Barboza

Nome dos integrantes da equipe

Sâmila Natiane Ferreira, Bruna Fadel, Nicole Woldmar, Gabriella Poralla, Sheila Lopez, Mariana Figueiredo, João Meirelles

Resumo do Projeto (máximo 1500 caracteres)

Desde o primeiro caso de pneumonia provocada por patógeno desconhecido em dezembro de 2019 até o anúncio da OMS de pandemia por COVID-19 no dia 11 de março de 2020, foi observado uma busca da ciência por respostas e maior conhecimento sobre o patógeno e a doença. A identificação e caracterização do novo SARS-CoV-2 foi relativamente rápida e impulsionou muitos estudos. Porém seguimos com muitas dúvidas, com uma alta taxa de letalidade e sem um tratamento específico. O foco atual é a diminuição da transmissibilidade para não sobrecarregar os hospitais, e o controle da resposta inflamatória do paciente grave a fim de diminuir a letalidade da doença. A evolução do paciente para o estado grave com dano tecidual, vem sendo associada ao aumento de fatores pró-inflamatórios, como as citocinas IL-1B, IL-6, IL-8, IFN- γ , TNF e as quimiocinas CCL-2, CCL-5, CCL-3, IP-10 γ . Assim o objetivo do presente estudo é caracterizar a associação entre polimorfismos e haplótipos nos genes IL6, IL6R, IL1B e IFNG e relacionar com o perfil proteômico presente no plasma sanguíneo de pacientes com apresentação de formas graves da COVID-19 em uma coorte do Rio de Janeiro.

Caso tenha algum financiamento, especificar o tipo

Bolsa COVID UFRJ

Observações

Título do Projeto

Sensores Plasmônicos Nanoestruturados aplicados a detecção de SARS-Cov-2

Nome do Coordenador

Daniel Grasseschi

Nome dos integrantes da equipe

Maiara Oliveira Salles (DQA/IQ/UFRJ), Anderson Sá Pinheiro (DBQ/IQ/UFRJ), Daniella Lopez (DQA/IQ/UFRJ), Christiano J. S. de Matos (Mackgraphen/ Universidade Presbiteriana Mackenzie), João F. Cajaíba da Silva (DQO/IQ/UFRJ), Vinícius Kartnaller (DQA/IQ/UFRJ).

Resumo do Projeto (máximo 1500 caracteres)

Com o advento da nanotecnologia, nanopartículas plasmônicas têm introduzido novas possibilidades a serem exploradas na área de sensores químicos, permitindo uma variedade de aplicações. Por apresentarem interessantes propriedades ópticas relacionadas com a oscilação dos elétrons superficiais em ressonância com a radiação eletromagnética, os processos de absorção e espalhamento de luz em nanomateriais plasmônicos são intensificados e podem ser explorados de forma a aumentar o limite de teste analíticos clássicos até o nível de detecção de uma única molécula e sendo capazes de fornecer informações em tempo real.

A introdução de materiais plasmônicos em testes portáteis, também chamados de testes de campo, ou point-of-care (POC), é especialmente vantajoso dentro do cenário atual brasileiro, onde somos um dos países que menos realiza testes para detecção do SARS-Cov-2, são cerca de 1.300 testes por milhão de habitantes, enquanto que em países como Estados Unidos, Espanha, Itália e Alemanha, o número de testes por milhão de habitantes varia entre 14 e 26 mil.

O presente projeto tem como objetivo principal o desenvolvimento de sensores plasmônico baseados em nanomateriais metálicos de Au, Ag e Cu (puros ou em ligas bimetálicas) funcionalizados com bioreceptores (proteínas ou ácidos nucleicos) para detecção de biomarcadores específicos do vírus SARS-Cov-2, podendo estes ser o RNA viral, fragmentos de proteínas estruturais ou mesmo anticorpos circulantes.

Caso tenha algum financiamento, especificar o tipo

No momento não temos financiamento para esse projeto. Estamos redirecionando de outros projetos e aguardando a análise de FAPERJ referente ao edital Ação Emergencial Projetos para Combater os Efeitos da Covid-19.

Observações -----

Título do Projeto

Síntese de gliconjugados heterocíclicos para identificação de novas moléculas como inibidores potentes da RNA polimerase dependente de RNA de COVID-19

Nome do Coordenador

Sabrina Baptista Ferreira

Nome dos integrantes da equipe

Resumo do Projeto (máximo 1500 caracteres)

O surto atual da nova doença infecciosa por coronavírus COVID-19 é causado pelo SARS-CoV-2. Em 3 de maio de 2020, mais de 3,44 milhões de casos foram relatados em 187 países e territórios, resultando em mais de 243.000 mortes. No Brasil, são mais de 97.000 casos infectados e 6.500 mortes. Esta doença se espalhou rapidamente pelo mundo, considerando a ameaça potencial de uma pandemia. Cientistas e médicos têm corrido para entender esse novo vírus e a fisiopatologia dessa doença para descobrir possíveis regimes de tratamento e descobrir vacinas e agentes terapêuticos eficazes. Devido à gravidade da situação, a Organização Mundial da Saúde (OMS) declarou os surto do vírus corona de 2019–20 como uma Emergência de Saúde Pública de Preocupação Internacional. A abordagem mais imediata para um surto é vasculhar o armário de medicamentos em busca de moléculas existentes que possam ser redirecionadas contra um novo vírus. Portanto, a situação atual exige a reengenharia e o reposicionamento de antigas famílias de medicamentos para o desenvolvimento de novos agentes antivirais com novos mecanismos de ação. Este projeto terá uma abordagem multidisciplinar na concepção e síntese de novas moléculas heterocíclicas gliconjugadas, utilizando novas metodologias com características estruturais de drogas antivirais, podendo fornecer um novo arcabouço para avaliação biológica contra COVID-19.

Caso tenha algum financiamento, especificar o tipo

EDITAL Nº 11/2020 - apoio de custeio e bolsa de doutorado e pós-doutorado

Observações

Esse projeto faz parte como um subprojeto do projeto aprovado pelo Programa de Pós-Graduação em Química do IQ, coordenado pelo Prof Marco Antônio Chaer do Nascimento, no EDITAL DE SELEÇÃO EMERGENCIAL II PROGRAMA ESTRATÉGICO EMERGENCIAL DE COMBATE A SURTOS, ENDEMIAS, EPIDEMIAS E PANDEMIAS "CAPES - FÁRMACOS E IMUNOLOGIA" EDITAL Nº 11/2020

Título do Projeto

Desenvolvimento de um sensor químico para COVID-19

Nome do Coordenador

Simon J. Garden

Nome dos integrantes da equipe

Por enquanto: Grupo de Fotoquímica - Profs. Nanci, Sebastian e Rodrigo

Resumo do Projeto (máximo 1500 caracteres)

Sensores químicos são dispositivos de medição que convertem uma propriedade física ou química de um analito específico em um sinal mensurável. A magnitude deste sinal é proporcional à concentração do analito. O processo de detecção pode ser baseado em diferentes mecanismos de reconhecimento molecular e a resposta física ao evento de detecção pode ser observada por vários meios. As sondas fluorogênicas, que têm propriedades de ligar / desligar em resposta à presença ou ausência de um analito, são um meio poderoso de detecção do evento de reconhecimento. Este projeto investiga a otimização das propriedades fotofísicas de novas sondas fluorogênicas. Duas abordagens para a detecção de material viral estão sendo investigadas: sondas fluorogênicas para conjugação com aptâmeros de RNA e modificação de pequenas moléculas conhecidas que se ligam às proteínas do vírus.

Caso tenha algum financiamento, especificar o tipo

Fundação Simão Jardim, Reaproveitamento de materiais adquiridos em projetos anteriores financiados pelas agências CNPq e FAPERJ

Observações

Título do Projeto

Utilização de alvos biológicos viral ou humano associado a ferramentas computacionais, como modelagem comparativa ou por homologia, docagem (docking) molecular, triagem virtual

Nome do Coordenador

Camilo Henrique da Silva Lima

Nome dos integrantes da equipe

Magaly Girão Albuquerque, Bruno Araújo Cautiero Horta

Resumo do Projeto (máximo 1500 caracteres)

O presente projeto tem como objetivo contribuir com uma abordagem importante na busca de candidatos a fármacos capazes de inibir etapas cruciais durante o processo de infecção viral na CoViD-19. Os principais alvos enzimáticos descritos são 3CLpro, PLpro, RdRp e replicase nsp9, cujas estruturas 3D estão disponíveis no PDB; a construção e a validação, via modelagem por homologia, do modelo gerado para a TMPRSS2; a identificação de resíduos envolvidos na atividade catalítica de cada alvo identificado; o estabelecimento de um protocolo de docagem molecular por consenso; e a identificação das principais interações intermoleculares para os candidatos a fármacos selecionados.

Caso tenha algum financiamento, especificar o tipo

CAPES - Edital Nº11/2020

Observações

Este é um subprojeto que faz parte do projeto "Desenvolvimento de ferramentas para combate a COVID-19: reposicionamento de fármacos, síntese de novos protótipos antivirais e novas ferramentas de diagnóstico." aprovado pelo edital Nº11/2020 (CAPES) e coordenado pelo prof. Marco Antonio Chaer do Nascimento

Título do Projeto

Triagem virtual de substâncias bioativas de uma quimioteca em dois possíveis alvos moleculares (Protease principal e RNA polimerase) de SARS-CoV-

Nome do Coordenador

Camilo Henrique da Silva Lima

Nome dos integrantes da equipe

Marcelle de Lima Ferreira Bispo (UEL), Carla Cristina Perez (UEL), Alexandre Orsato (UEL), Gabriel Felix da Silva Gomes (PG), Kaio Maciel de Santiago Silva (PG), Priscila Goes Camargo de Carvalho (PG)

Resumo do Projeto (máximo 1500 caracteres)

O presente projeto tem como objetivo estabelecer um protocolo de triagem virtual para dois importantes alvos, Protease principal e RNA polimerase, para o processo de infecção viral na CoViD-19. Após estabelecimento de um protocolo de docagem molecular por consenso, uma quimioteca construída por grupos de pesquisa da UEL, contendo substâncias sintéticas, semissintéticas e metabolitos secundários de diferentes bactérias, será avaliada. Os melhores resultados terão suas principais interações intermoleculares avaliadas, sendo selecionados para teste in vitro frente ao CoViD-19.

Caso tenha algum financiamento, especificar o tipo

CAPES - Edital N°11/2020

Observações

Este é um subprojeto que faz parte do projeto “Descoberta de substâncias-líderes antivirais para o combate da COVID-19 a partir de uma quimioteca de ampla diversidade estrutural” aprovado pelo edital N°11/2020 (CAPES) e coordenado pelo prof. Gerson Nakazato.

Título do Projeto

Planejamento de novos inibidores duais de proteínas-alvo do ciclo de replicação do SARS-CoV-2 por modelagem molecular como potenciais antivirais contra a CoViD-19

Nome do Coordenador

Camilo Henrique da Silva Lima

Nome dos integrantes da equipe

Magaly Girão Albuquerque, Ana Paula Sotero da Silva Ribeiro (IC)

Resumo do Projeto (máximo 1500 caracteres)

O presente projeto tem como objetivo propor inibidores duais para alvos importantes do ciclo de replicação do CoViD-19. Os alvos selecionados serão enzimas associadas ao processo de infecção, e. g. ACE2 e TMPRSS2, e ao processo de replicação, e. g. 3CLpro, PLpro ou RdRp. A seguir, técnicas computacionais, como modelagem comparativa ou por homologia, docagem (docking) molecular e triagem virtual, serão utilizados para avaliar bancos de substâncias ativas. Os melhores resultados terão suas principais interações intermoleculares avaliadas, sendo selecionados para teste in vitro frente ao CoViD-19.

Caso tenha algum financiamento, especificar o tipo

PIBIC-UFRJ

Observações

Este é um projeto submetido ao Programa de Institucional de Bolsas de Iniciação Científica 2020, referente ao Edital CEG/CEPG N° 169, de 13 de maio de 2020, contemplado com uma bolsa para o período de setembro de 2020 a agosto de 2021.