

## VirtualCure

Rapide Entwicklung e. automatisierten & erweiterbaren In-silico High-Throughput Drug Repurposing Screening-Pipeline

|                                 |                                       |                        |            |
|---------------------------------|---------------------------------------|------------------------|------------|
| <b>Programm / Ausschreibung</b> | BASIS, Basisprogramm, Budgetjahr 2021 | <b>Status</b>          | laufend    |
| <b>Projektstart</b>             | 01.05.2021                            | <b>Projektende</b>     | 29.04.2022 |
| <b>Zeitraum</b>                 | 2021 - 2022                           | <b>Projektlaufzeit</b> | 12 Monate  |
| <b>Keywords</b>                 |                                       |                        |            |

### Projektbeschreibung

Innophore hat im Jänner 2020 begonnen, das Genom des SARS-CoV-2 Erregers sofort nach der Veröffentlichung nach Proteinen und Enzymen zu durchsuchen, die als Angriffspunkte für eine therapeutische Intervention dienen könnten. Dies erfordert die Translation der genetischen Information in Aminosäure-Sequenzen. In nur 12 Stunden ist es gelungen, die Struktur eines der Schlüsselenzyme von SARS-Cov-2, die „main pro-tease“ (Mpro) ausfindig zu machen und deren modellierte Struktur zu veröffentlichen. Innophores Modell war damit das erste öffentlich verfügbare Modell weltweit und wurde viele tausend Male heruntergeladen.

Das Erkenntnis dieser Vorprojektphase war, dass Innophores Catalophore Plattform enorme Vorteile hinsichtlich Performance und Schnelligkeit bei der Suche nach Strukturen eines Zielproteins aufweist, die wiederum der erste Schritt sind um mögliche Hemmstoffe, Inhibitoren, zu suchen. Um diese Suche weiter zu beschleunigen, ist es auch eine bewährte Strategie, innerhalb bereits zugelassener Wirkstoffen und Medikamenten gezielt zu suchen und Drug Repurposing anzuwenden. Die Herausforderung bei der Beschleunigung von Repurposing Verfahren liegt aber insbesondere darin, eine in-silico Technologie zu entwickeln, welche möglichst schnell, möglichst viele potentielle Verbindungen auf ihre Fähigkeit hin, z.B. enzymatische Reaktionen anzustoßen oder zu hemmen, valide beurteilen und auch Wirkungsweise und mögliche Nebenwirkungen von bestehenden Medikamenten bei neuen Indikationen vorhersagen kann. Genau setzt das gegenständliche Projekt an:

Innophores Projektziel ist die rasche Entwicklung einer automatisierten und erweiterbaren In-silico High-Throughput Drug Repurposing Screening-Pipeline („VirtualCure“) zur Identifizierung von Zielstrukturen. Nach Abschluss des ersten Projektjahres wird dieses Verfahren speziell für die Behandlung von Covid-19 Patienten wertvoll sein. In Folge, kann dieser Ablauf dann auch gegen andere virale Erreger und (mit weiteren Anpassungen) in Zukunft auch für industrielle Anwendungen eingesetzt werden.

### Projektpartner

- Innophore GmbH