

CORONAVIRUS: SCOPERTE 35 MOLECOLE PER COMBATTERLO, ALLA GUIDA DEL PROGETTO ANCHE INFN

29 Aprile 2020



ROMA - Scoperte 35 molecole per combattere il virus SarsCoV2, grazie a una potenza di calcolo analoga a quella che l'Italia ha utilizzato per scoprire il bosone di Higgs; una appartiene alla famiglia dell'idrossiclorochina.

Descritte sul sito ArXiv, ora potranno affrontare i test per capire se potranno diventare farmaci. Sono state selezionate fra le 9.000 analizzate dal progetto guidato dall'azienda Sybilla Biotech e dall'Istituto Nazionale di Fisica Nucleare (Infn).

Le molecole, che adesso potranno cominciare il percorso di test in laboratorio per capire se potranno diventare futuri farmaci anti Covid-19, agiscono impedendo al nuovo coronavirus di legarsi alla sua nelle cellule umane. Spin-off dell'Istituto Nazionale di Fisica Nucleare (Infn) e delle università di Trento e Perugia, la Sibylla Biotech ha individuato due bersagli per le nuove molecole: sono due tasche che si trovano nella struttura principale porta d'ingresso utilizzata dal nuovo coronavirus per invadere le cellule umane, il recettore Ace2 che, oltre che sulle cellule dell'apparato respiratorio, si trova su quelle di molti altri organi, compresi cuore e intestino. Le tasche sono due stati intermedi che la struttura della proteina Ace2 assume ripiegandosi su stessa ed entrambe possono diventare due 'talloni d'Achille' per il coronavirus.

Una volta individuate grazie ai calcolatori messi a disposizione dall'Infn, le due tasche sono state confrontate con i circa 9.000 farmaci già commercialmente disponibili oppure in fase di sperimentazione clinica per verificare quali, fra questi sono state individuate le 35 molecole promettenti. Fra queste una appartiene alla famiglia chimica dell'idrossiclorochina e verrà valutata in laboratorio con altre sei molecole della stessa famiglia.

L'idrossiclorochina sembra limitare la replicazione del virus in vitro, ma le sue potenzialità contro la Covid-19 sono discusse e controverse.

Nell'ipotesi, ancora da dimostrare, di una qualche efficacia clinica, l'analisi condotta da Sibylla Biotech potrebbe contribuire a spiegarne il meccanismo d'azione molecolare e alla messa a punto di protocolli clinici mirati. Su richiesta, Sibylla mette liberamente a disposizione la ricostruzione a livello atomico delle tasche di legame di ACE2, affinché chi possiede molecole proprietarie possa eseguire dei test al computer e quindi in laboratorio su questi bersagli.