

Descubren cinco compuestos que inhiben la proteína que replica el SARS-CoV-2

Investigadores de la Facultad de Química y del Instituto de Química Teórica y Computacional (IQTC) de la Universidad de Barcelona (noreste de España) descubrieron cinco moléculas de compuestos naturales que inhiben la proteasa principal -Mpro- del virus SARS-CoV-2, la proteína que ayuda al coronavirus a replicarse.

El trabajo, que publica la revista 'Journal of Chemical Information and Modeling' y fue dirigido por el catedrático Jaime Rubio Martínez, abre nuevas perspectivas para diseñar estrategias terapéuticas en la lucha contra la COVID-19.

El nuevo avance científico se consiguió usando el cribado virtual (in silico), una técnica de análisis computacional para seleccionar moléculas candidatas a futuros fármacos en una biblioteca química.

Así, hallaron moléculas de productos naturales que son capaces de inhibir el Mpro, la principal proteasa del virus SARS-CoV-2, una proteína no estructural que tiene un papel esencial en la replicación y transcripción de este virus y que se considera una potencial diana terapéutica, ya que si se pudiera inhibir podría evitar la progresión del virus.

Actualmente, el tratamiento de la COVID-19 consiste en tratar sus síntomas mediante agentes antiinflamatorios (por ejemplo, la dexametasona o inhibidores de citoquinas) combinados con antibióticos para tratar infecciones secundarias.

También se aprobó el antiviral ritonavir, pero todavía hay necesidad de nuevos medicamentos y por ello los científicos pusieron en marcha diversas estrategias para identificar compuestos bioactivos que se puedan utilizar como agentes terapéuticos (incluidos los fármacos disponibles y los productos naturales).

En este contexto, el cribado virtual es un procedimiento fiable, rápido y eficiente para descubrir compuestos bioactivos de grandes colecciones químicas contra un objetivo molecular específico o diana.

En esta investigación, el equipo de la Universidad de Barcelona

llevó a cabo un cribado virtual de la base de datos Selleck de productos naturales -una biblioteca química con cerca de 2.000 compuestos- para ver si hay alguna que inhiba la proteasa Mpro del virus SARS-CoV-2, mediante simulaciones y un ensamblaje molecular virtual.

Se trata de un método bioinformático que permite predecir y calcular con técnicas computacionales la posición más favorable de interacción entre un ligando y su proteína diana.

De esta forma seleccionaron once compuestos y probaron in vitro su capacidad de inhibir la proteasa Mpro y finalmente han identificado cinco candidatos antivirales SARS-CoV-2, inhibidores de la proteasa Mpro, a partir de la base de datos de productos naturales.

EFE