

La UJI busca un fármaco para evitar la réplica del virus del Covid

Una investigación trabaja en el diseño asistido por ordenador de este antiviral

CASTELLÓN

Dos grupos de investigación de la Universitat Jaume I, dirigidos por el catedrático Vicent Moliner del Instituto de Materiales Avanzados (INAM) y por el catedrático José Ignacio Aliaga del Departamento de Ingeniería y Ciencia de los Computadores, trabajan en la actualidad en el diseño asistido por ordenador de fármacos para el tratamiento de la Covid-19, a través del uso de *machine learning* (ML) y métodos QM/MM (mecánica cuántica y mecánica molecular).

El grupo de Bioquímica Computacional y el de Computación y Arquitecturas de Alto Rendimiento (HPC&A por sus siglas en inglés) trabajan en un proyecto de dos años de duración cuyo objetivo es «diseñar compuestos antivirales para hacer frente al virus», según ha explicado Moliner.

El objetivo final, ha añadido Moliner, es obtener un fármaco antiviral que permita bloquear la réplica del virus, un proceso que precisa varias etapas, en cada una de las cuales participa una enzima. El proyecto quiere 'atacar' una de estas enzimas,

y se basa en estudios computacionales centrados en la exploración de reacciones de proteólisis catalizada –degradación de proteínas–, seguidos del estudio del proceso de inhibición. «Primero obtuvimos información valiosa sobre el mecanismo de acción de esta enzima, que tiene lugar en cuatro pasos. Las predicciones resultantes fueron la base para el posterior estudio de la inhibición», ha destacado.

«Primero exploramos un inhibidor conocido, N3, que muestra una prometedora actividad inhibitora. A partir de estos trabajos y en la información sobre otros inhibidores estudiados en nuestro laboratorio, hemos diseñado y probado computacionalmente nuevos inhibidores para bloquear la enzima», ha afirmado el catedrático.

La enzima concreta objeto del trabajo «no existe en el ser humano, y esa es la ventaja que tenemos, porque los procesos humanos no son tan diferentes entre bacteria, virus y ser humano», ha dicho. «Si nos centramos en atacar otro paso, otra enzima diferente, podríamos estar atacando también



Los miembros de los grupos de investigación de la UJI. C. A. D.

enzimas del cuerpo humano, con los consecuentes posibles efectos secundarios», ha argumentado.

En febrero de 2020, cuando la pandemia se manifestó, el equipo del proyecto ya estaba estudiando procesos similares. «A partir de la publicación de un trabajo científico ese año, tratamos de diseñar moléculas que bloquearon la enzima, y en los siguientes procesos hemos propuesto nuevas moléculas», ha señalado Vicent Moliner. Para la realización del proyecto, se ha incorporado equipamiento específico gracias a un proyecto Idifeder, adjudicado por la Conselleria de Innovación, Universidades, Ciencia y Sociedad Digital de la Generalitat Valenciana.

Mediante la simulación por ordenador, en la que también se emplea inteligencia artificial (IA) mediante algoritmos basados en redes neuro-

nales, han propuesto ya cuatro moléculas, y cuando hay un resultado que creen que puede ser efectivo, lo pasan a colaboradores de otros departamentos para que lo sinteticen en laboratorio, y después se envía a otros colaboradores para que hagan las pruebas biológicas, comprueben su eficacia y garanticen la inexistencia de efectos secundarios.

PREMIO EN MOVILIDAD

Por otro lado, la UJI ha recibido uno de los galardones de la VII Edición de los Premios de la Semana Europea de la Movilidad 2022 de la Comunidad Valenciana por el proyecto del Jardí del Temps, que convertirá el espacio situado entre la Facultad de Ciencias Humanas y Sociales y el edificio de Deportes, pensado hasta ahora para los coches, en una zona verde.