

Un projecte d'investigació de l'UJI avança en el disseny informàtic de fàrmacs per a tractar la Covid-19



Dirigits pel catedràtic Vicent Moliner de l'Institut de Materials Avançats (INAM) i pel catedràtic José Ignacio Aliaga del Departament d'Enginyeria i Ciència dels Computadors.

L'objectiu final és obtenir un fàrmac antiviral que permeta bloquejar la rèplica del virus, un procés que requereix diverses etapes, en cada una de les quals participa un enzim

Dos grups d'investigació de la [Universitat Jaume I](#), dirigits pel catedràtic **Vicent Moliner de l'Institut de Materials Avançats (INAM) i pel **catedràtic José Ignacio Aliaga** del Departament d'Enginyeria i Ciència dels Computadors, treballen en l'actualitat en el **disseny assistit per ordinador de fàrmacs per al tractament de la Covid-19**, a través de l'ús de *machine learning* (ML) i mètodes QM/MM (mecànica quàntica i mecànica molecular). El grup de **Bioquímica Computacional i el de Computació i Arquitectures d'Alt Rendiment** (HPC&A per les seues sigles en anglès)**

treballen en un projecte de dos anys de durada que té com a objectiu "dissenyar compostos antivirals per a fer front al virus", segons explica Moliner.

L'objectiu final, prossegueix Moliner, és obtenir un fàrmac antiviral que permeta bloquejar la rèplica del virus, un procés que requereix diverses etapes, en cada una de les quals participa un enzim. **El projecte vol "atacar" un d'aquests enzims**, i es basa en estudis computacionals centrats en l'exploració de reaccions de proteòlisi catalitzada (degradació de proteïnes), seguits de l'estudi del procés d'inhibició. "Primer vam obtenir informació valuosa sobre el mecanisme d'acció d'aquest enzim, que té lloc en quatre passos", explica Moliner. Les prediccions resultants van ser la base per a l'estudi posterior de la inhibició. "Primer vam explorar un inhibidor conegut, N3, que mostra una prometedora activitat inhibidora. A partir d'aquests treballs i en la informació sobre altres inhibidors estudiats al nostre laboratori, hem dissenyat i provat computacionalment nous inhibidors per a bloquejar l'enzim", afirma el catedràtic.

L'enzim concret objecte del treball "no existeix en l'ésser humà, i aqueix és l'avantatge que tenim, perquè els processos humans no són tan diferents entre bacteri, virus i ésser humà". Moliner argumenta que "si ens centràrem a atacar un altre pas, **un altre enzim diferent, podríem estar atacant també enzims del cos humà**, amb els conseqüents possibles efectes secundaris".

El mes de febrer de 2020, quan la pandèmia es va manifestar, l'equip del projecte ja estava estudiant processos semblants: a partir de la publicació d'un treball científic aqueix any, "vam tractar de dissenyar molècules que bloquejaren l'enzim, i en els processos següents hem proposat noves molècules", argumenta Vicent Moliner. Per a la realització del projecte, s'ha incorporat equipament específic gràcies a un projecte IDIFEDER, adjudicat per la **Conselleria d'Innovació, Universitats, Ciència i Societat Digital** de la Generalitat Valenciana.

Mitjançant la simulació per ordinador, en la qual també s'empra intel·ligència artificial (IA) mitjançant algorismes basats en xarxes neuronals, "hem proposat ja quatre molècules, i quan tenim un resultat que creiem que pot ser efectiu, el passem a col·laboradors d'altres departaments perquè el sintetitzen en laboratori, i després s'envia a altres col·laboradors perquè facen les proves biològiques", comproven la seua eficàcia i garantisquen la inexistència d'efectes secundaris en l'ésser humà.