

COMUNICATO STAMPA

UNITUS: SI STUDIANO FARMACI PER IMPEDIRE L'INGRESSO DEL CORONAVIRUS NELLE CELLULE UMANE

I professori Giovanni Chillemi e Stefano Borocci del DIBAF hanno pubblicato un articolo che confronta sequenze, struttura e dinamica della proteina spike in coronavirus da pangolino, pipistrello e uomo (<https://www.mdpi.com/1422-0067/22/1/80>), scritto in collaborazione con virologi dell'Università della Florida (USA) e Tunisia. I docenti hanno anche prodotto un modello utilizzato per l'identificazione di potenziali farmaci in grado di inibire l'interazione tra la proteina spike ed il recettore ACE2 impedendo in questo modo l'ingresso del virus all'interno delle cellule umane. Lo studio è stato rivolto anche all'interazione tra la proteina spike ed il recettore umano ACE2, che è utilizzato da ricercatori della Dompé farmaceutici per spiegare (video 3D https://youtu.be/qc_7GPJSofQ), le caratteristiche del virus mutato in Danimarca che ha portato all'abbattimento di milioni di visoni d'allevamento. Le simulazioni sono state condotte al centro di supercalcolo Cineca, grazie alla finanziamento EU del progetto PRACE "Molecular Dynamics investigation of the interaction between ACE2 and the spike glycoprotein of SARS-CoV-2" (<https://prace-ri.eu/prace-support-to-mitigate-impact-of-covid-19-pandemic-awarded-projects/>).

La collaborazione tra Dompé e DIBAF prosegue e attualmente è in corso lo studio mediante simulazioni di dinamica molecolare della variante inglese del Covid allo scopo di indagare la sua maggiore capacità infettiva, grazie a risorse di calcolo fornite dal progetto EU EXASCALATE4COV (<https://www.exscalate4cov.eu>).

Viterbo 31.12.2020