

# Buscando antivirales naturales de bajo costo para COVID-19 con blanco en Spike de SARS-CoV-2 mediante modelado y simulación molecular

*miércoles, 27 de julio de 2022 10:00 (15 actas)*

La pandemia de COVID-19, causada por el virus SARS-CoV-2, moldeó la vida en el bienio 2020-22 como pocos eventos recordados entre la población de nuestro planeta. Su impacto global se cuantifica en más de 6M muertes y 529M infecciones (Our-World-in-Data, <https://ourworldindata.org/explorers/coronavirus-data-explorer,30/05/22>) las que, en largo plazo, redundan en cuadros de variado tipo, tanto tras casos graves como leves o asintomáticos, que meses después manifiestan en proporción significativa “long-COVID” (Raveendran et al., 2021, Diabetes & Metab Syndrome: Clin Res & Rev, 15(3), 869). Las estrategias exploradas en ámbitos de colaboración científica mundial implicaron integrar disciplinas, grandes esfuerzos de comunicación y acceso inmediato a los avances alcanzados. Ello incluyó medidas físicas y sociales de profilaxis, desarrollo de herramientas de detección rápida y confiable, vacunas y campañas de vacunación masiva y búsqueda/ desarrollo de fármacos. En esto último se apeló en primer lugar a estrategias de reposicionamiento de sustancias de perfil conocido, usadas en la clínica de otras patologías junto al desarrollo de fármacos ex novo, requiriendo integrar aspectos de la biología viral y del proceso de infección, con posibilidad de intervenir en alguna de sus fases. En esta dirección contribuimos desde el modelado y simulación computacional de moléculas bioactivas y macromoléculas biológica. Para ello seleccionamos a nivel molecular un universo de especies químicas con potencial acción anti-COVID19 presentes en un medicamento de origen natural con eficacia documentada ante otras patologías virales y modelamos sus propiedades fisicoquímicas, seleccionando los 5 mejores y simulando su interacción con el dominio de unión (RBD) de la glicoproteína Spike(S), proteína estructural del virus que inicia la infección por reconocimiento no covalente con el receptor ACE2 en la célula humana (Hoffmann et al., 2020, Cell, 181(2), 271). Nuestros resultados permiten identificar dos mejores candidatos para ensayos de actividad de anti-COVID, y claves de su modulación, aportando a comprender mecanismos de bloqueo sobre Spike de la infección.

## Palabras clave

antivirales naturales, bajo costo, Spike RBD, cribaje QM-PCM

## Características de la colaboración

Este trabajo se generó a partir de autores y coautores que ya colaboraban antes de la pandemia

## Interinstitucionalidad

No

## Interdisciplina

Si

**Autores primarios:** Sra. SALAZAR, Fabiana (LQTC-IQB-FCien-Udelar); Sr. SASTRE, Santiago (LQTC-IQB-FCIEN-UDELAR); Dr. BONANATA, Jenner (LQTC-IQB, Facultad de Ciencias, Udelar); Prof. COITIÑO IZAGUIRRE, E. Laura (LQTC-IQB-Facultad de Ciencias y CEINBIO- Udelar)

**Presentador:** Prof. COITIÑO IZAGUIRRE, E. Laura (LQTC-IQB-Facultad de Ciencias y CEINBIO- Udelar)

**Clasificación de la sesión:** Eje 7\_2 Investigación básica. Presentaciones orales

**Clasificación de pistas: .**