



### **RICERCA – COVID-19**

## **PUBBLICATI I PRIMI RISULTATI DELLE SIMULAZIONI BIOMOLECOLARI DI SIBYLLA BIOTECH**

Sibylla Biotech, spin-off dell'INFN e delle Università di Trento e Perugia, ha pubblicato su ArXiv i primi risultati delle simulazioni biomolecolari avviate in marzo grazie alle 30.000 unità di calcolo messe a disposizione dall'INFN. Lo studio, realizzato in collaborazione con l'INFN, riporta l'individuazione di due bersagli, finora sconosciuti, per il design di farmaci, ovvero due "tasche" nelle strutture intermedie di ACE2, una proteina che si trova normalmente sulla superficie delle cellule polmonari (oltre che delle cellule di altri organi come cuore e intestino) e che il virus SARS-CoV-2 usa come 'porta d'ingresso' per l'infezione. Questi due stati intermedi della proteina sono stati analizzati in tempi rapidissimi grazie alle risorse di calcolo dell'INFN per verificare la loro capacità di legare con i circa 9000 farmaci già commercialmente disponibili oppure in fase di sperimentazione clinica. In questa fase preliminare, che dovrà necessariamente essere seguita da test in laboratorio per poter dare risposte definitive, Sibylla Biotech ha già identificato 35 molecole promettenti. Tra cui anche una molecola della famiglia chimica cui appartiene l'idrossiclorochina, che pure risulta legare l'intermedio di ACE2 e verrà valutata in laboratorio insieme ad altre 6 molecole analoghe della stessa famiglia e alle 35 selezionate al computer. ■