Comunicado 031
Ciudad de México, 23 de febrero de 2021

ANALIZAN POLITÉCNICOS EFECTIVIDAD DE COMPUESTOS CON BORO COMO INHIBIDORES DE SARS-CoV-2

- ***El blanco farmacológico seleccionado es la proteasa principal del virus que rompe las proteínas y otras estructuras y le permite replicarse dentro de la célula huésped***

- ***Encontraron 3 órganoborados con alto potencial, que han sido utilizados como fármacos para de tratar algunos tipos de cáncer***

De acuerdo con un análisis computacional realizado por investigadores del Instituto Politécnico Nacional (IPN), algunos compuestos que contienen boro en sus estructuras podrían actuar como potenciales inhibidores del SARS-CoV-2, resultado que fue reportado en la revista internacional *Current Chemical Biology*, cuya editorial *Bentham Science* ha dedicado parte de sus esfuerzos a la investigación sobre este coronavirus.

Los especialistas de la Escuela Superior de Medicina (ESM), Eunice Farfán García y Marvin Soriano Ursúa, junto con los estudiantes de Maestría, Melvin Nadir Rosalez y Martín Santiago Quintana, además del candidato a Doctor, Iván Ricardo Vega Valdez, por la Escuela Nacional de Ciencias Biológicas (ENCB), indicaron que varios compuestos borados son agentes químicos atractivos para actuar como potenciales inhibidores de la proteasa principal del virus.

Detallaron que un grupo de científicos alemanes lograron decodificar la estructura en 3D de la proteasa principal del SARS-CoV-2 (M^{pro} o $3CL^{pro}$), una enzima componente del virus capaz de romper proteínas y otras estructuras de la célula, lo que le permite hospedarse y generar copias de sí mismo o replicarse, por eso es un blanco farmacológico de gran interés.

“Con la estructura de la proteasa del virus cristalizada, preparamos el estudio computacional (*in silico*), y de un conjunto de millones de compuestos, elegimos 150 candidatos con mayor probabilidad de interacción y a sus estructuras les incluimos al menos un átomo de boro, en virtud de que se ha demostrado, que tal modificación puede aumentar su capacidad para adherirse a sitios clave e inhibir la interacción entre el virus y las células del cuerpo humano”, resaltaron los investigadores.

Dentro de los compuestos que tienen mayor potencial de inhibición, se encontraron algunos borados de uso comercial, que son utilizados en fármacos para tratar algunos tipos de cáncer, como el Bortezomib, además del Ixazomib y Delanzomib, que podrían ser sujetos a pruebas *in vitro* para determinar su posible efectividad antiviral.

Otro hallazgo importante que reportaron los investigadores politécnicos en el documento "Docking Simulations Exhibit Bortezomib and other Boron-containing Peptidomimetics as Potential Inhibitors of SARS-CoV-2 Main Protease", es el tamaño que debe tener la molécula utilizada para elaborar un fármaco contra SARS-CoV-2, equivalente a una cadena de cuatro aminoácidos unidos, que en el caso de compuestos borados, son lo suficientemente grandes como para adherirse de manera firme al sitio activo de la proteasa del virus.

--o0o--