



Anche la siciliana Rimed tra i cacciatori di una cura per sconfiggere il Covid

La ricerca. Il gruppo di Chimica computazionale ha saputo individuare 65 delle mille molecole ritenute promettenti in un bando mondiale Jedi

MARIA AUSILIA BOEMI

Partendo da 530 milioni di molecole disponibili, 500 ricercatori di 130 gruppi in tutto il mondo si sono messi a caccia di una cura specifica contro il Covid-19 partecipando al bando "Jedi Grandchallenge - Billion Molecules against Covid-19" promosso dalla Joint European Disruptive Initiative (Jedi). E tra questi cacciatori di farmaci c'è anche la siciliana Fondazione Rimed che, con il proprio gruppo di Chimica computazionale guidato dal palermitano Ugo Perricone e con la collaborazione di Maria De Rosa, principal investigator in Chimica medicinale della Fondazione, ha scovato 65 delle mille molecole selezionate da una commissione internazionale come potenzialmente promettenti per curare il Covid.

«Durante il primo lockdown - spiega il dott. Perricone, group leader del team di Chimica computazionale della Rimed - è partita un'iniziativa a livello internazionale di Jedi relativamente alla ricerca di molecole che possano inibire il Covid, colpendo alcuni target di questo virus. A questo bando partecipano 130 gruppi di ricerca a livello mondiale che, in questa prima fase, hanno selezionato molecole potenzialmente attive quali farmaci sulla base di algoritmi al computer». In altre parole, i cacciatori di cura contro il Covid utilizzano il computer e, tramite l'intelligenza artificiale e il machine learning, cercano di predire l'attività di un potenziale farmaco partendo da una base disponibile di 530 milioni di molecole con caratteri-

stiche farmaceutiche.

Insomma, una caccia alle molecole che potrebbero attaccare il Covid: «Abbiamo presentato la nostra proposta, come hanno fatto gli altri 129 gruppi partecipanti, e ci hanno comunicato qualche giorno fa che la commissione internazionale, delle iniziali 530 milioni di molecole, ne ha selezionato

mille interessanti dal punto di vista farmaceutico e, di queste mille, 65 sono del nostro gruppo (che ne aveva presentate 3.000). Quindi siamo arrivati alla fase finale in cui ci sono 65 molecole identificate dal gruppo di lavoro della Rimed e che ora verranno prodotte in laboratorio e testate su modelli in vitro per vedere se effettivamente hanno una attività di inibizione sul virus. Qualora ci fosse un risultato positivo dai test effettuati, in palio ci sono per il gruppo 250mila euro da investire nella ricerca».

Queste 65 molecole della Rimed, oltre a essere giudicate a livello teorico come potenzialmente attive, «possono essere realmente realizzate chimicamente in laboratorio, con costi sostenibili. Quindi il primo step che abbiamo superato è stata la valutazione delle tecniche computazionali utilizzate per selezionare queste molecole, il secondo step superato era invece relativo alla fattibilità delle molecole».

Ma il gruppo del dott. Perricone non si ferma qui: «Devo dire onestamente - spiega il ricercatore - che noi abbiamo partecipato a questo bando soprattutto perché per noi era importante metterci alla prova e capire co-



► 13 dicembre 2020

me stanno lavorando i gruppi di ricerca a livello mondiale perché in Rimed, a prescindere da questo progetto, stiamo portando avanti una ricerca sul Covid su più fronti. In particolare, il nostro studio si focalizza sulla ricerca di molecole che possano agire su una specifica proteina - la proteasi - del virus, identificata da noi come una delle più importanti e promettenti ad essere colpite da un punto di vista farmaceutico per inibire la replicazione del virus». Una ricerca, quest'ultima Rimed, che necessita di almeno un anno per potere vedere i primi risultati, mentre per l'iniziativa Jedi «i tempi dovrebbero essere più brevi, perché lì sono coinvolte aziende farmaceutiche di grosso calibro, con le loro relative strutture importanti».

