

- **COVID-19: ¿Podemos encontrar un fármaco?**

Esta es la pregunta que nos hemos hecho desde el principio del brote de la COVID-19.

El desarrollo de una vacuna puede tardar más de un año, y no es seguro que una sola vacuna sea eficiente para todos, ya que el virus muta con el tiempo y según el área geográfica afectada. A lo mejor, harán falta más vacunas.

- **Entonces, ¿por qué no encontrar un fármaco?** Muchos investigadores están proponiendo fármacos, basándose exclusivamente en la experiencia previa adquirida en la lucha contra otras enfermedades (como el VIH). Sin embargo, estas propuestas carecen de una base molecular, esencial para guiar la elección de fármacos con mayor selectividad.

- **¿Hay alternativas?** Sí.

La **modelización y simulación molecular** pueden ayudar en la **reducción del tiempo** necesario para encontrar y adoptar de manera extendida fármacos apropiados. De hecho, estas técnicas computacionales son capaces hoy en día de ofrecer una resolución sin precedentes, llegando a entender a nivel molecular las interacciones entre proteínas y, más en general, estructuras microbiológicas de naturaleza compleja. En particular, la dinámica molecular proporciona una **resolución temporal del comportamiento de estructuras biológicas**, permitiendo describir con precisión sus evoluciones y reordenamientos a la hora de expresar sus **funciones en el cuerpo humano**. Es evidente, entonces, que estas técnicas permiten la discriminación de posibles fármacos **candidatos antivirales**, basados en sus capacidades de interactuar con el virus, **perturbando el ataque y proliferación** del mismo.