

عنوان مقاله:

مطالعه بیوانفورماتیکی داروهای ضد ویروسی بر گلیکوپروتئین سطحی اسپایک (S) در کرونا ویروس با استفاده از نرم افزار Autodock Vina

محل انتشار:

هفتمین کنگره ملی زیست شناسی و علوم طبیعی ایران (سال: 1399)

تعداد صفحات اصل مقاله: 6

نویسندگان:

فاطمه کریمی - دانشجوی کارشناسی ارشد بیوشیمی، دانشگاه اصفهان

رحمان امام زاده - دانشیار گروه سلولی و مولکولی و میکروبیولوژی، دانشکده علوم و فناوریهای زیستی، دانشگاه اصفهان

محبوبه نظری - دانشیار گروه پژوهشی ایمنونوشیمی و فرآوردههای نو ترکیب، پژوهشگاه ابنسینا، پژوهشکده آنتیبیادی مونوکلونال، تهران،
دانشگاه شهید بهشتی

خلاصه مقاله:

شیوع اخیر کرونا ویروس سندروم حاد2(SARS-CoV-2) عامل ایجاد کننده بیماری کرونا ویروس19(covid19) در دسامبر2019، نگرانیهای جهانی بهداشت را برانگیخته است. SARS-CoV-2 یک RNA ویروس تک رشته ای با سو مثبت است. دوره نهفتگی از 2 تا 14 روز متغیر است و بعد از این مدت علائم و نشانه های بیماری ظاهر میشود. علائم و نشانه های رایج میتواند شامل تب، سرفه، خستگی و علائم دیگر شامل: تنگی نفس یا مشکل در تنفس، درد عضلانی، لرز، گلودرد، از بین رفتن طعم یا بو، احساس سردرد و درد قفسه سینه میباشد. SARS-CoV-2 از طریق گیرنده آنزیم مبدل آنژیوتانسین نوع2 به سلولهای ریه حمله میکند و باعث درگیر شدن این سلولها میشود. مطالعات نشان دادهاند که گلیکوپروتئین اسپایک(S) نقش مهمی در اتصال به گیرنده آنزیم مبدل آنژیوتانسین نوع2 برای ورود به سلول دارند. داروهای ضد ویروسی مانند Nelfinavir، Remikiren، Chloroquine، و Ledipasvir برای کاهش علائم COVID-19 استفاده میشوند. در این مطالعه، انرژی اتصال داروها به حوزه محل اتصال گیرنده در گلیکوپروتئین اسپایک(S) توسط مطالعات silico بررسی شده است. ساختار سه بعدی داروها از سرور بانک دارویی و قالب پی دی بی گیرنده (VYB6) از بانک داده های پروتئینی (PDB) دریافت شد. سپس، گیرنده و داروها متصل شدند و انرژی اتصال و بازده اتصال با استفاده از نرم افزار Autodock Vina ارزیابی شد. نتایج نشان داد که Nelfinavir دارای اتصال پایدارتری با گیرنده است زیرا انرژی اتصال کمتری نسبت به سایر داروهای ذکر شده دارد. از ترکیبات Nelfinavir ممکن است برای تولید داروهای ضد ویروسی جدید علیه COVID 19 استفاده شود.

کلمات کلیدی:

کرونا ویروس، Autodock Vina، Nelfinavir، گلیکوپروتئین اسپایک (S)

لینک ثابت مقاله در پایگاه سیویلکا:

<https://civilica.com/doc/1029006>

