

عنوان مقاله:

بررسی بیوانفورماتیکی اثر ترکیب پیرین در مهار آنزیم LU7 به منظور درمان بیماری کرونا

محل انتشار:

ششمین کنفرانس ملی نوآوری و فناوری علوم زیستی شیمی ایران (سال: ۱۴۰۱)

تعداد صفحات اصل مقاله: 6

نویسنده:

مرضیه عزیزی - دانشجوی کارشناسی میکروبیولوژی، موسسه‌ی آموزش عالی نوردانش، میمه، اصفهان، ایران

خلاصه مقاله:

مقدمه: ویروس‌های کرونا خانواده‌ی بزرگی از ویروسها هستند که میتوانند حیوانات و انسانها را بیمار کنند. تعداد زیادی از ویروس‌های کرونا که تا کنون شناخته شده‌اند، موجب ابتلاء طیفی از عفونت‌های دستگاه تنفسی در انسانها می‌شوند. هدف: این مطالعه قصد دارد با هدف بررسی بیوانفورماتیکی اثر ترکیب پیرین در مهار آنزیم LU7 که پروتئاز اصلی ویروس کروناست، در جهت معرفی ترکیبات موثر در درمان بیماری کرونا کامی بردارد. روش: در این مطالعه برای بررسی نحوه‌ی اتصال ترکیبات به جایگاه فعال آنزیم، ترسیم ساختار شیمیایی ترکیبات، بهینه سازی انرژی، مطالعات داکینگ و تجزیه و تحلیل‌های نهایی به ترتیب از سرور آنلاین Dock H و نرم افزارهای Chimera، Hyperchem، Discovery و سرور Pdb استفاده شد. دستاوردهای مقاله: ترکیب مورد مطالعه قادر به اشغال جایگاه فعال آنزیم می‌باشد و سطح انرژی اتصال، $115.82\text{--}115.82\text{ کیلوkalori}$ باشد.

کلمات کلیدی:

کرونا، آنزیم LU7 ، پیرین، داکینگ مولکولی، مهار آنزیم

لینک ثابت مقاله در پایگاه سیویلیکا:

<https://civilica.com/doc/1535303>

