

## عنوان مقاله:

بررسی بیوانفورماتیکی اثر ترکیبات شوگائول ، جینجروول و آپی ژنین در مهار آنزیم ۶lu۷ به منظور درمان بیماری COVID-۱۹

## محل انتشار:

نهمین همایش ملی مطالعات و تحقیقات نوین درحوزه زیست شناسی و علوم طبیعی ایران (سال: 1401)

تعداد صفحات اصل مقاله: 10

## نویسنده:

پرنیا هوشیاری - دانشجوی کارشناسی علوم آزما یشگاهی ، دانشگاه آزاد اسلامی واحد پزشکی ، تهران ، ایران

## خلاصه مقاله:

زمینه و هدف : بیماری کرونا ویروس سال ۲۰۱۹ یا COVID-۱۹ نوعی بیماری عفونی است که عامل آن ویروس کرونا می باشد. این بیماری اساسا به شکل عفونت تنفسی بروز می نماید ؛ هرچند درگیری سایر اعضا و دستگاه ها نیز مشاهده شده است . سازمان بهداشت جهانی در ۳۰ ژانویه ۲۰۲۰ این بیماری را به عنوان یک همه گیری جهانی اعلام کرد. این مطالعه قصد دارد با هدف بررسی بیوانفورماتیکی اثر ترکیبات شوگائول ، جینجروول و آپی ژنین در مهار آنزیم ۶lu۷ که با ساختاری ۲ زنجیری ، اصلی ترین پروتئاز کرونا ویروس محسوب می شود ؛ در جهت معرفی ترکیبات موثر در درمان بیماری COVID-۱۹ گامی بردارد. روش ها : در این مطالعه برای بررسی نحوه ی اتصال ترکیبات به جایگاه فعال آنزیم ، ترسیم ساختار شیمیایی ترکیبات ، بهینه سازی انرژی ، مطالعات داکینگ و تجزیه و تحلیل های نهایی به ترتیب از سرور آنلین H Dock و نرم افزارهای chimera ، Discovery ، Hyperchem و سرور Pdb Sum Generate استفاده شد. یافته ها : ترکیبات مورد نظر قادر به اشغال جایگاه فعال آنزیم می باشند و سطح انرژی اتصال در شوگائول -۱۱۶.۷۱ ، در جینجروول - ۱۳۴.۰۱ و در آپی ژنین -۱۴۵.۷۰ بود. نتیجه گیری : با توجه به اثر بخشی ترکیبات در مطالعه ی بیوانفورماتیکی ، برای بررسی های تکمیلی می توان اثر این ترکیبات را در شرایط in vitro و in vivo مورد آنالیز قرار داد.

## کلمات کلیدی:

آنزیم ۶lu۷ ، داکینگ مولکولی ، کووید ۱۹ ، ترکیبات موثر

## لینک ثابت مقاله در پایگاه سیویلیکا:

<https://civilica.com/doc/1566999>

