

عنوان مقاله:

طراحی و داکینگ تعدادی از مشتقات پیریمیدین به عنوان ترکیبات ضد مالاریا

محل انتشار:

مجله طب نظامی، دوره 22، شماره 4 (سال: 1399)

تعداد صفحات اصل مقاله: 9

نویسندگان:

اصغر داود - واحد علوم دارویی

مریم ایمان - مرکز تحقیقات آسیبهای شیمیایی، موسسه سیستم بیولوژی و مسمومیت، دانشگاه علوم پزشکی بقیه الله، تهران، ایران

محمدرضا طاهری - دپارتمان شیمی

خلاصه مقاله:

زمینه و هدف: بر اساس آخرین تخمین منتشر شده توسط سازمان جهانی بهداشت در سال ۲۰۱۷ تعداد مبتلایان به مالاریا ۲۱۹ میلیون نفر بوده و مالاریا سبب مرگ ۴۳۵ هزار نفر گردیده است. با ظهور سویه های مقاوم به دارو در مالاریا، نیاز به اهداف جدید دارویی در هر زمان وجود دارد. در این مطالعه طراحی و داکینگ مشتقات پیریمیدین برای مهار آنزیم متیونین آمینوپتیداز (MetAP1b) انجام شد که به عنوان ترکیبات ضد مالاریا به عنوان داروی جدید و درجهت مقابله با مقاومت دارویی در نظر گرفته شده است. روش ها: مطالعات داکینگ با برنامه AutoDock انجام شد. ساختار مولکول ها با برنامه Hyperchem کشیده شد و با روش Semi-empirical بهینه گردید. یافته ها: مطالعات داکینگ نشان داد که مهمترین پیوندهای درگیر در اتصال دارو با گیرنده پای-پای، پای-کاتیون و پیوند هیدروژنی می باشند. افزایش پیوندهای پای-پای و پای-کاتیون در افزایش قدرت این گروه از ترکیبات موثر است. همچنین درمجموع مشخص شد که ترکیب شماره ۷ موثرترین ترکیب در اتصال در جایگاه فعال آنزیم می باشند. نتیجه گیری: بر اساس نتایج به دست آمده از مطالعات داکینگ، تمامی ترکیبات طراحی شده تاثیرات مهارتی خوبی را در جایگاه فعال آنزیم از خود نشان می دهند اما ترکیب ۷ بهترین اثر مهارتی را از خود نشان داد. با توجه به نتایج حاصل از شیمی محاسباتی ترکیب شماره ۷ می تواند به عنوان کاندید داروی جدید ضد مالاریا باشد.

کلمات کلیدی:

داکینگ، مالاریا، ۲-پیریدیل پیریمیدین، متیونین آمینوپتیداز b1، شبیه سازی دینامیک مولکولی

لینک ثابت مقاله در پایگاه سیویلیکا:

<https://civilica.com/doc/1735120>

