

اولین مقاله چاپ شده در خصوص بیماری COVID-19 در

دانشگاه رازی

Inhibitory Activity of FDA-Approved Drugs Cetilistat, Abiraterone, Diiodohydroxyquinoline, Bexarotene, Remdesivir, and Hydroxychloroquine on COVID-19 Main Protease and Human ACE2 Receptor: A Comparative In Silico Approach

Nahid Shahabadi, Saba Zندهcheshm, Mohammad Mahdavi, Fatemeh Khademi

[https://authors.elsevier.com/sd/article/S2352-9148\(21\)00221-5](https://authors.elsevier.com/sd/article/S2352-9148(21)00221-5)



ELSEVIER

Informatics in Medicine Unlocked

Volume 26, 2021, 100745



دکتر ناهید شاه آبادی عضو هیئت علمی دانشگاه رازی به همراه دو تن از دانشجویان مقطع دکترای شیمی معدنی (صبا زنده چشم و محمد مهدوی) موفق به انتشار اولین مقاله ISI در خصوص بیماری کوید ۱۹ در دانشگاه رازی شدند.

به گزارش روابط عمومی دانشگاه رازی در دسامبر ۲۰۱۹ شیوع نوع جدیدی از بیماری حاد تنفسی (پنومونی) ویروسی در مرکز چین گزارش گردید و تعداد افراد مبتلا به آن نیز به سرعت افزایش یافت. پزشکان این بیماری را COVID-19 نامگذاری کرده و منشأ آنرا ویروسی با نام SARS-COV-2 معرفی نمودند.

دکتر ناهید شاه آبادی گفت: در روش تجربی مولکولها ساخته می‌شوند و سپس مورد آزمایش قرار می‌گیرند، بدون آنکه بتوان عملکرد آنها را از قبل به طور دقیق پیش‌بینی کرد. این فرآیند آزمایش به خودی خود طولانی، خسته کننده و دست و پا

گیر است و ممکن است عوارض بعدی را پیش‌بینی نکند که باعث افزایش نسبت هزینه به سود می‌شود. به طور کلی هر گاه یک بیماری شناسایی می‌شود، سفر جدیدی در دنیای شیمی شروع به جستجوی دارویی می‌کند که می‌تواند در مقابله با بیماری‌ها مفید واقع شود.

امروزه از محاسبات به عنوان بخش ضروری و جدایی ناپذیر علوم زیستی، پزشکی و دارویی یاد می‌شود به طوری که بیشتر پژوهش‌های امروزی دقت، سرعت و صحت خود را مدیون استفاده از علوم محاسباتی هستند.

در مطالعه حاضر با توجه به اهمیت محاسبات کامپیوتری در شناسایی سریع داروهای مجاز برای درمان کرونا از روش شبیه سازی داکینگ و دینامیک ملکولی استفاده شده است.

داروهای مورد بررسی عبارتند از ستیلیستات (ضد چاقی)، آبیرون (ضد سرطان)، دی آیدو هیدروکسی کینولین (درمان عفونت)، بکساروتن (ضد سرطان)، با فرض اینکه بتوانند از عمل پروتئاز اصلی ویروس جلوگیری کنند و بعلاوه بتوانند بر اتصال به ACE نیز بازدارنده باشند. رمدسیویر (ضد ویروس) و هیدروکسی کلروکین (ضد مالاریا) به عنوان داروهایی که برای بهبود بیماری کرونا استفاده میشوند برای مقایسه بررسی شدند.

نتایج نشان داد که داروهای ستیلیستات، آبیرون، دی آیدو هیدروکسی کینولین و بکساروتن در مهار اتصال به گیرنده بهتر از هیدروکسی کلروکین عمل می‌کنند و اتصال بکساروتن و ستیلیستات بسیار محکمتر از داروی رمدسیویر است. البته مطالعات بعدی نیز مورد نیاز است و در صورت فراهم بودن سیستم‌های قویتر نتایج سریع و بهتری نیز بدست خواهد آمد و دستیابی به این نتایج نیاز به سرمایه‌گذاری مستمر در توسعه محاسبات کوانتومی به عنوان یک فناوری دارد.