

## دراسة حسابية للإمكانيات العلاجية لسلسلة جديدة من مشتقات إيميدازول ضد السارس - CoV-2

### الملخص العربي:

نتيجة للحاجة الملحة للتدخلات العلاجية ضد جائحة فيروس السارس ٢ (SARS-CoV-2)، استخدمنا نهجًا في السيليكو لتقييم إمكانات تثبيط SARS-CoV-2 بواسطة إيميدازولات مصنعة حديثًا. تم فحص الإمكانيات المثبطة للمركبات ضد SARS-CoV-2 عن طريق فحص البروتياز الرئيسي (Mpro) والبروتين السنبل (Spro) والبوليميراز RNA المعتمد على RNA (RdRp) من خلال تحليل الالتحام الجزيئي. تم تقدير الطاقة الحرة الناتجة عن اتحاد الدواء بالبروتينات كما تم إنشاء نماذج دوائية كما تم تحديد الامتصاص والتوزيع والتمثيل الغذائي وكذلك خصائص الإفراز والسمية (ADMET) للمركبات. وقد أظهرت المركبات مستويات مختلفة من قابلية الاتحاد بالأهداف الدوائية ل SARS-CoV-2، حيث سجل بيسيميدازول C2 أعلى مستوى ضد جميع الأهداف، مع حلقاته العطرية بما في ذلك مجموعتي الإيميدازول المساهمة في الترابط. من بين مركبات H-imidazoles المستبدلة بالفينيل، سجل C9 أعلى مستوى ضد جميع الأهداف. و من بين مركبات ال thiophene-imidazoles سجل C11 أعلى نقاط ضد Spro و C12 ضد Mpro و RdRp. وقد تفاعلت المركبات مع HIS 41 - CYS 145 و GLU 288 e ASP 289 e GLU 290 of Mpro و ASN 501 of GLU 288 e ASP 289 e GLU 290 of Mpro، نمودج ربط مستقبلات Spro وبعض الأحماض الأمينية النشطة في الموقع لـ RdRp. هذه المركبات الجديدة للإيميدازول يمكن تطويرها بشكل أكبر كأدوية مرشحة لعلاج SARS-CoV-2 بعد الدراسات التجريبية.