قطاع الدراسات الصيدلية
اللجنة العلمية للكيمياء الصيدلية والحيوية (٩٤)
الدورة الثالثة عشر (٢٠١٩-٢٠٢٢)

البحث رقم (٣) في القائمة

١- بيانات الباحث:

اسم المتقدم:	محمد إبراهيم عبداللطيف إبراهيم حامد
القسم التابع له:	الكيمياء العضوية والدوائية
الكلية التابع لها:	الصيدلة – جامعة الفيوم

٢- بيانات البحث:

ت- عنوان البحث:	
باللغة العربية:	رؤى حاسوبيه حول إمكانات بعض مضادات الإلتهاب الخالية من الستيرويد لعلاج الكوفيد-١٩: وضع الأولويات وتحسين المركب الأساسى
باللغة الإنجليزية:	Computational Insights on the Potential of Some NSAIDs for Treating COVID-19: Priority Set and Lead Optimization
ب- النشر	
إسم المجلة	Molecules
العدد وسنة وتاريخ ورقم الصفحات بالنشر	2021, 26(12), 3772
معامل التأثير	4.412

٣- الملخص:

باللغة العربية:

يعد اكتشاف الأدوية القادرة على تثبيط السارس-CoV-2 أولوية بالنسبة للبشر بسبب شدة الوباء الصحي العالمي الناجم عن كوفيد-19. تحقيقًا لهذه الغاية ، يمكن أن توفر إعادة استخدام الأدوية المعتمدة من قِبل إدارة الأغذية والعقاقير (FDA) مثل الأدوية غير الستيرويدية المضادة للالتهابات ضد كوفيد-١٩ بدائل علاجية يمكن استخدامها كعلاج آمن فعال لـ كوفيد-١٩. يعد النشاط المضاد للإلتهاب للأدوية غير الستيرويدية المضادة للالتهابات مفيدًا أيضًا في علاج كوفيد-١٩ ، حيث وجد أن SARS-CoV-2 مسؤول عن إثارة عواصف خلوية عارمة تؤدي إلى تلف الرئة. في هذه الدراسة تم تقييم ٤٠ من مضادات الالتهاب غير غير الستيرويدية المعتمدة من قبل إدارة الغذاء والدواء من خلال النمذجة الجزيئية ضد الأنزيم البروتيني الرئيسي لـ SARS-CoV-2. من بين المركبات التي تم اختبارها ، تم ترشيح سولفينبيرازون 2 و إندوميثاسين 3 و أورانُوفين 4 كمثبطات محتملة للبروتياز الرئيسي لكوفيد-١٩. تم أيضًا إجراء محاكاة الديناميات الجزيئية للأدوية الواعدة من الأدوية غير الستيرويدية المضادة للالتهابات الذين تم فحصهم (٢ و ٣ و ٤) لكشف الخصائص الديناميكية للأدوية غير الستيرويدية المضادة للالتهابات في المستقبل المستهدف. كشفت الدراسة الميكانيكية الكمية التي أجريت أن الوظيفية الهجينة B3PW91 وفرت وصفًا جيدًا للمعلمات الفراغية لأورانُوفين 4. ومن المثير للإهتمام ، أنه تم التوصل إلى علاقة واعدة بين البنية والنشاط (SAR) من دراستنا والتي يمكن أن تساعد في التصميم المستقبلي لمثبطات محتملة للبروتياز الرئيسي لسارس-CoV-2 مع التأثيرات المضادة للالتهابات المتوقعة أيضًا. كما يمكن إستخدام الأدوية غير الستيرويدية المضادة للالتهابات من قبل الكيميائيين الطبيين كمركبات محتملة لتطوير مثبطات قوية لسارس-CoV-2 (M^{pro}). بالإضافة إلى ذلك يمكن تخصيص بعض الأدوية غير الستيرويدية المضادة للالتهابات بشكل انتقائي لعلاج الإلتهابات الناتجة عن كوفيد-١٩.