

عنوان مقاله:

استفاده از داکینگ مولکولی برای طراحی آنالوگ های جدید از Fingolimod که از طریق مهار گیرنده S₁P₁، مولتیپل اسکلروزیس را هدف قرار می دهد

محل انتشار:

ششمین کنفرانس بین المللی یافته های نوین در علوم پزشکی و بهداشت با رویکرد ارتقای سلامت (سال: 1402)

تعداد صفحات اصل مقاله: 8

نویسندگان:

هانیه صباغیان - گروه شیمی، دانشکده شیمی و مهندسی شیمی، دانشگاه تحصیلات تکمیلی صنعتی و فناوری پیشرفته، کرمان، ایران

مهدی یوسفیان - گروه شیمی، دانشکده شیمی و مهندسی شیمی، دانشگاه تحصیلات تکمیلی صنعتی و فناوری پیشرفته، کرمان، ایران

خلاصه مقاله:

این مطالعه به بررسی پتانسیل آنالوگ های جدید Fingolimod در تعدیل انتخابی عملکرد گیرنده S₁P₁ از طریق داکینگ مولکولی می پردازد. این آنالوگ ها به عنوان کاندیدهای دارویی بالقوه ای که قادر به مختل کردن عملکرد گیرنده S₁P₁ هستند، بررسی می شوند و به طور بالقوه کارایی درمانی را در مقایسه با Fingolimod بهبود می بخشند. این تحقیق بر نقش محوری داکینگ مولکولی به عنوان ابزاری کلیدی در کشف داروهای جدید برای مدیریت ام اس و سایر بیماری های ناشی از سیستم ایمنی تأکید می کند. علاوه بر این، نتایج نشان می دهد که این آنالوگ های جدید می توانند به عنوان کاندیدهای درمانی موثر برای کاهش میزان عود، کند کردن پیشرفت بیماری و کاهش تشکیل ضایعات جدید مغزی در افراد مبتلا به ام اس معرفی شوند. این مطالعه نقش مرکزی داکینگ مولکولی را در شناسایی تعدیل کننده های قوی گیرنده S₁P₁ برای مدیریت MS برجسته می کند. تجزیه و تحلیل انرژی دقیق ثابت ها و بازدارنده های اتصال به ویژه نشان می دهد که بازدارنده به نام FGL₂₆ تمایل بازدارندگی بالاتری با انرژی ۹.۵- در مقایسه با ۳۶ بازدارنده دیگر نشان می دهد. این یافته مهم نشان می دهد که FGL₂₆ ممکن است یک بازدارنده قوی برای سرکوب فعالیت گیرنده S₁P₁ در نظر گرفته شود. چنین تجزیه و تحلیل داده ها به ما اجازه می دهد تا ویژگی های بازدارنده را بهتر تفسیر کنیم و استفاده از FGL₂₆ را به عنوان یک بازدارنده قوی برای کنترل فعالیت گیرنده S₁P₁ در تلاش های تحقیقاتی آینده در نظر بگیریم. به طور کلی، این تحقیق به طور قابل توجهی به بهبود کیفیت زندگی بیماران ام اس و پیشبرد گزینه های درمانی برای این بیماری کمک می کند و داکینگ مولکولی را به عنوان ابزاری موثر در تحقیقات کشف دارو به نمایش می گذارد.

کلمات کلیدی:

گیرنده Fingolimod، S₁P₁، ضایعات مغزی، ام اس (Multiple Sclerosis)

لینک ثابت مقاله در پایگاه سیویلیکا:

<https://civilica.com/doc/1944501>

