

Découverte d'inhibiteurs flavonoïdes potentiels contre le sars-cov 2 basée sur une stratégie du docking moléculaire

Bochra BENCHEIKH ^{1*}, Rayenne DJEMIL ¹

¹Laboratoire de chimie computationnelle et nanostructures, Université 8 mai 1945, P.O. B.P. 401,
Guelma, 24000, Algérie

Code CCO 4

E-mail*: b.bencheikh24@gmail.com

Résumé

En décembre 2019, une épidémie de pneumonie d'étiologie inconnue a éclaté dans la ville de Wuhan (Chine). Le nouveau coronavirus connu d'abord sous le nom de 2019-nCoV, puis officiellement identifié comme sras-cov-2 continue de se propager et de croître de manière exponentielle dans le monde entier. Le virus atteint les poumons par les récepteurs de l'enzyme de conversion de l'angiotensine 2 (ACE2). Parmi tous les traitements proposés liés aux infections à coronavirus, les dérivés de flavonoïdes sont suggérés comme des thérapies alternatives dans la lutte contre le Covid-19. Cette recherche vise à déterminer les composants d'origine naturelle pouvant prévenir l'infection par le coronavirus. Le docking moléculaire est appliqué pour explorer le mode de liaison entre 10 flavonoïdes et la chloroquine avec le récepteur (ACE2). deux des 10 composants ont obtenu un score total élevé. Par la suite, le mode de liaison des deux molécules sélectionnées a été analysé et détaillé plus en détail. De plus, ces deux inhibiteurs ont été testés pour leurs propriétés ADMET et leurs propriétés de type médicament. Ces découvertes pourraient être utiles pour rechercher de nouveaux inhibiteurs contre le coronavirus.

Mots clés: Composés flavonoïdes ; Enzyme de conversion de l'angiotensine 2 (ACE2); docking moléculaire ; SRAS-CoV-2; ADMET.

