

## **Simulations de la dynamique moléculaire de l'ASC09, du ritonavir, du lopinavir et du darunavir avec la protéase COVID-19**

**Budimir S. Ilić<sup>1</sup>**

*1- Université de Niš, Faculté de médecine, Département de chimie 18000 Niš, Serbie*

### **Résumé**

En raison de l'apparition de la nouvelle infection SARS-CoV-2 (COVID-19), ainsi que du manque de thérapie éprouvée, aujourd'hui s'emploient les diverses stratégies dans la lutte contre la pandémie de COVID-19. De nombreuses stratégies reposent sur l'usage des médicaments existants et sur leur mécanisme de fonctionnement, qui sont efficaces contre des infections virales similaires ou des symptômes graves ressemblants au COVID-19. La structure cristalline de la protéase du COVID-19 récemment déterminée a rendu possible une liaison entre la structure de la protéase et les activités des substances. L'interaction de l'ASC09, du ritonavir, du lopinavir et du darunavir avec la protéase COVID-19 a été simulée à l'aide du module Site Finder, de l'ancrage moléculaire et de la dynamique moléculaire (MD). L'analyse des trajectoires MD a fourni les empreintes digitales d'interaction ligand/récepteur, en donnant des informations sur les acides aminés cruciaux des récepteurs et la fréquence des contacts ligand/récepteur. Les fréquences des contacts et les cartes de contacts suggèrent que pour les médicaments antiviraux étudiés, les interactions avec Gln 107, Pro 108, Gln 110 et His 246 sont un facteur décisif dans l'affinité de liaison des médicaments pour la protéase COVID-19. De même, les interactions principales avec Arg 105, Phe 134, Glu 240, Thr 243, Asp 245 ou Phe 294 contribuent d'une manière significative à l'affinité de liaison différente des médicaments examinés pour la protéase COVID-19.

*Mots-clés: COVID-19, dynamique moléculaire, ASC09, ritonavir, lopinavir, darunavir*