

## **Molekularna dinamika ASC09, ritonavira, lopinavira i darunavira sa COVID-19 proteazom**

**Budimir S. Ilić<sup>1</sup>**

*1- Univerzitet u Nišu, Medicinski fakultet, Departman za hemiju, 18000 Niš, Srbija*

### **Sažetak**

Usled pojave nove infekcije SARS-CoV-2 (COVID-19) kao i nedostatka dokazane terapije, danas se koriste različite metode u pokušaju borbe protiv pandemije COVID-19. Mnoge od ovih metoda oslanjaju se na primenu već postojećih lekova koji su efikasni protiv sličnih virusnih infekcija ili ozbiljnih simptoma sličnih COVID-19. Nedavno određena kristalna struktura COVID-19 proteaze omogućila je povezivanje strukture proteaze sa aktivnostima supstanci. Interakcija ASC09, ritonavira, lopinavira i darunavira sa COVID-19 proteazom simulirana je korišćenjem modula Site Finder, molekularnog dokinga i molekularne dinamike (MD). Analiza MD trajektorija obezbedila je uvid u interakcije ligand/receptor, pružajući informacije o ključnim aminokiselinama receptora i frekvenciji kontakata ligand/receptor. Frekvencije kontakata i mape kontakata sugerišu da su za proučavane antivirusne lekove interakcije sa Gln 107, Pro 108, Gln 110 i His 246 odlučujući faktor u vezivanju lekova za proteazu COVID-19. Takođe, vodeće interakcije sa Arg 105, Phe 134, Glu 240, Thr 243, Asp 245 ili Phe 294 značajno doprinose različitom afinitetu vezivanja ispitanih lekova za COVID-19 proteazu.

*Ključne reči: COVID-19, molekularna dinamika, ASC09, ritonavir, lopinavir, darunavir*