

بررسی مکانیک کوانتومی در تجزیه و تحلیل داروی Givinostat

حسین شیرانی^{۱*} و نیایش تاج الدینی^۲

^۱ و* -دکتری، شیمی فیزیک، گروه شیمی، دانشگاه علم و صنعت ایران، hossein_shirani@iust.ac.ir

^۲ - دانشجوی کارشناسی، زیست فناوری، گروه بیوتکنولوژی، دانشکده علوم و فناوری های زیستی، دانشگاه علم و فرهنگ

niyayeshhajoddini@gmail.com

واژگان کلیدی: دیستروپی عضلانی دوشن، B3LYP/6-311+G، هومو-لومو، Givinostat

۱-مقدمه

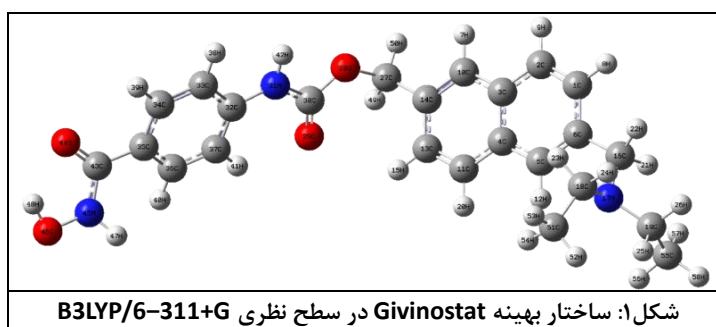
دیستروپی عضلانی دوشن، یک بیماری ژنتیکی است که بیشتر مردان جوان را تحت تأثیر قرار داده و باعث تحلیل سریع عضلات به دلیل نبود دیستروفین می شود. این بیماری حدود ۱ در ۳۵۰۰ تا ۵۰۰۰ پسر را در جهان درگیر می کند و درمان قطعی ندارد؛ درمان ها بیشتر بر مدیریت علائم تمرکز دارند.

در این میان، داروی Givinostat به عنوان گزینه ای امیدبخش با کاهش التهاب و فیبروز عضلانی، پیشرفت بیماری را کند کرده و عملکرد عضلات را حفظ می کند. این دارو در سال ۲۰۲۳ با نام Duvyza تأیید شد و امیدی برای بیماران ایجاد کرد.

۲-روش کار

ابتدا ساختار Givinostat را از پایگاه داده دارویی به دست آوردیم و سپس با بهره گیری از نرم افزار تصویری گوس ویو آن را مدل سازی کردیم. سپس، محاسبات مکانیک کوانتومی را در سطح نظری B3LYP/6-311+G با استفاده از نرم افزار گوسین انجام دادیم. پس از پایان محاسبات در گوس ویو، داده های مربوط به طول پیوند، زوایای میان اتم ها و دیگر ویژگی ها را استخراج کردیم.

۳-بحث و نتایج



ویژگی‌های ترمودینامیکی ساختار مولکولی Givinostat در سطح محاسباتی B3LYP/6-311+G تعیین شده است. گرمای تشکیل محاسبه شده برابر با ۸۷۶۱۹۰.۲۱۳- کیلوکالری بر مول است.

جدول ۱: مقادیر طول پیوند برای مولکول Givinostat با استفاده از روش محاسباتی B3LYP/6-311+G.					
۴C-۳C	۱۶C-۶C	۵۱C-۱۸C	۱۸C-۱۷N	۳۱N-۳۰C	۴۶O-۴۵N
۱.۴۲۹۴۱	۱.۵۱۸۴۹	۱.۵۲۷۱۰	۱.۴۶۹۷۴	۱.۳۷۴۹۸	۱.۴۰۱۳۷

جدول ۲: مقادیر زوایای پیوند برای مولکول Givinostat با استفاده از روش محاسباتی B3LYP/6-311+G.					
۱۸C-۱۷N-۱۹C	۴۴O-۴۳C-۴۵N	۲۸O-۳۰C-۲۹O	۲۷C-۱۴C-۱۰C	۴۳C-۳۵C-۳۶C	۱۱C-۴C-۵C
۵.۱۱۲	۳.۱۱۹	۲.۱۲۵	۴.۱۲۰	۲.۱۲۳	۳.۱۲۲

جدول ۳: مقادیر انرژی های هومو و لومو برای مولکول Givinostat با استفاده از روش محاسباتی B3LYP/6-311+G		
E_{HOMO}	HLG	E_{LUMO}
-۰.۲۲۵۶۶ev	-۰.۱۶۵۲۴ev	-۰.۰۶۰۴۲ev

۴- نتیجه گیری

این پژوهش به بررسی ویژگی‌های ساختاری و الکترونیکی داروی Givinostat، یک بازدارنده هیستون داستیلاز که در درمان دیستروفی عضلانی دوشن و دیگر شرایط التهابی به کار می‌رود، پرداخته است. با استفاده از روش محاسباتی B3LYP/6-311+G، به بهینه‌سازی ساختار مولکولی و تحلیل انرژی الکترونیکی، فرکانس‌های ارتعاشی و پارامترهای کلیدی ساختاری Givinostat پرداخته شد. این پژوهش بینش‌هایی در مورد طول پیوند، زاویه پیوند، و فاصله انرژی هومو و لومو ارائه می‌دهد که به درک بهتر از پتانسیل دارویی Givinostat و واکنش‌های آن در سیستم‌های دارورسانی کمک می‌کند.

منابع و مراجع

[۱] نقیعی بیدختی، دهستانی، شجاعی (۱۳۸۴). آشنایی با گوسین و شناسایی حالت گذار. انتشارات دانشگاه شهید باهنر کرمان.

[۲] Benedetti, S., Hoshiya, H., & Tedesco, F. S. (۲۰۱۳). Repair or replace? Exploiting novel gene and cell therapy strategies for muscular dystrophies. FEBS Journal, ۲۸۰(۱۷), ۴۲۶۳-۴۲۸۰. <https://doi.org/10.1111/febs.12423>