



◀ 上一篇 下一篇 ▶

2022年01月14日 星期五

放大 ⊕ 缩小 ⊖ 默认 ○

蛋白质Nsp13也许是新冠药物研发新靶点

科技日报北京1月13日电 (实习记者张佳欣) 新冠肺炎的许多治疗方法都将目标集中在病毒用于与人类细胞结合的刺突蛋白上。虽然这些疗法对原始新冠病毒效果很好,但对未来的新变种可能没有那么有效。根据近日发表在《科学进展》杂志上的论文,美国芝加哥大学普利兹克分子工程学院教授胡安·德·巴勃罗的团队利用先进的计算模拟技术研究了另一种对病毒复制至关重要的蛋白质——Nsp13,它在不同的冠状病毒中保持相对一致,属于一类被称为解旋酶的酶,这种酶在病毒的复制过程中发挥作用。

通过这项工作,科学家们还发现了三种不同的化合物,它们可以与Nsp13结合并抑制病毒复制。鉴于各种冠状病毒变异株的解旋酶序列的一致性,这些抑制剂可以作为设计靶向解旋酶的新冠肺炎治疗药物的开端。

德·巴勃罗说:“我们目前只有一种治疗新冠肺炎的方法,随着病毒的变异,我们绝对需要针对刺突蛋白之外的不同病毒构建块。我们的工作揭示了小分子如何在病毒复制中调节一个有吸引力的目标的行为,并表明现有的分子支架是治疗新冠肺炎的有希望的候选药物。”

研究人员发现,蛋白质Nsp13可以将双链DNA解离成两条单链,这是病毒复制过程中的关键一步。他们还发现,当外部分子与蛋白质的某些位点结合时,就会扰乱Nsp13中多个结构域的通信网络。这意味着Nsp13无法再有效地解开DNA,病毒的复制将变得更加困难。

据报道,有几种化合物可作为Nsp13抑制剂,此次,研究人员选择了三种化合物进行模拟测试:巴那宁、SSYA10-001和色原酮-4c。他们发现,这三种化合物似乎都能有效破坏Nsp13,因为它们与特定的位点结合,破坏了蛋白质的网络。现在,德·巴勃罗和他的合作者还将在实验室里测试他们的结果。

此前,该小组使用计算机分析来揭示药物依布罗嗪是如何与病毒的主要蛋白酶(Mpro)结合的。在另一项研究中,他们还揭示了抗病毒药物瑞德西韦是如何与病毒结合并干扰病毒的。他们还展示了复合木犀草素是如何抑制病毒的复制能力的。

研究人员称,他们利用模拟信息设计了一种治疗新冠肺炎的新药,希望在接下来的几个月内发表。

德·巴勃罗说:“我们新设计的药物可能会改变未来治疗新冠肺炎的‘游戏规则’。”

◀ 上一篇 下一篇 ▶

第04版: 国际

上一版 ◀ ▶ 下一版

- ▶ 奔跑吧!用你的“生物改造膝盖”
- ▶ 天文学家首次目睹恒星爆炸的“狂暴模样”
- ▶ 新兴风险叠加将影响经济前景
- ▶ 海藻提取物可抑制病毒感染细胞
- ▶ 专家称“德尔塔克戎”可能是“乌龙”
- ▶ 蛋白质Nsp13也许是新冠药物研发新靶点
- ▶ 世界首台新型同步激光加速器将建