

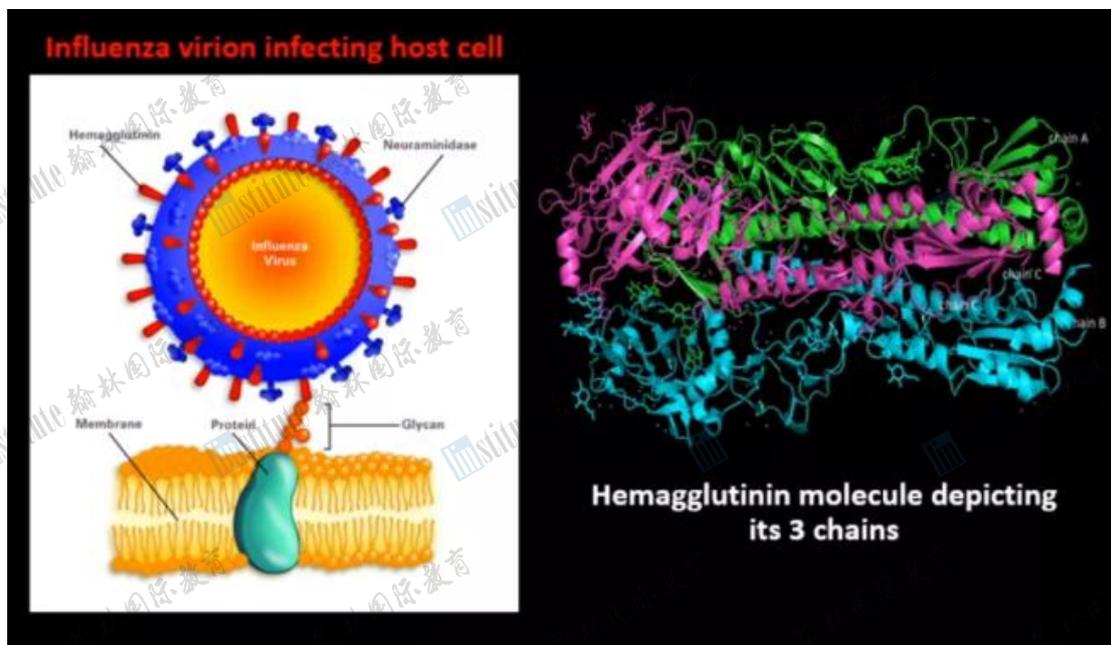
3M Young Scientist Challenge 3M 青年科学家挑战赛获奖作品赏析

2020 冠军介绍

14 岁女孩因新冠潜在疗法研究
获得 2020 青年科学家挑战赛冠军



美国德克萨斯州一位名叫 Anika Chebrolu 的 14 岁女孩在一项全美青年科学家挑战赛中夺魁，并获得 25,000 美元的奖金。她希望能够通过这项研究，为对抗新冠病毒提供潜在的治疗方法。



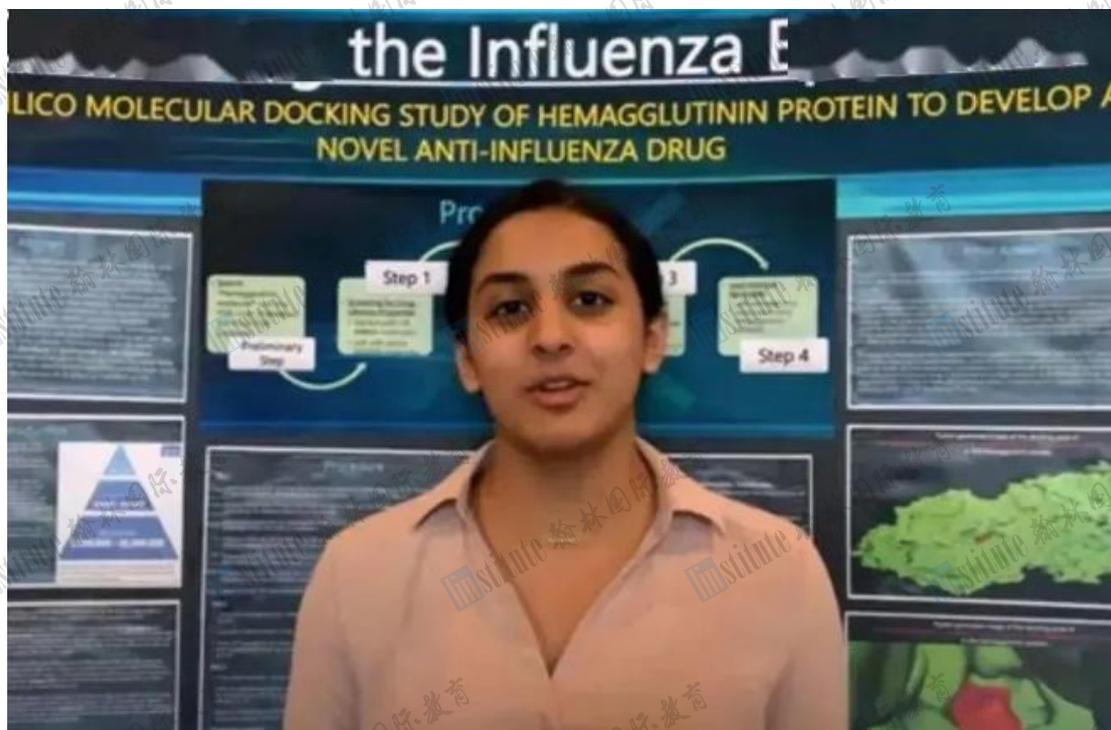
Anika 的项目展示（来源：youngscientistlab.com）

Anika Chebrolu 是美国尼尔森中学的一名学生。她的父亲 Srivasa Bhushan Chebrolu 医生，毕业于海得拉巴的奥斯马尼亚医学院（Osmania Medical College），是一名肾病专家。

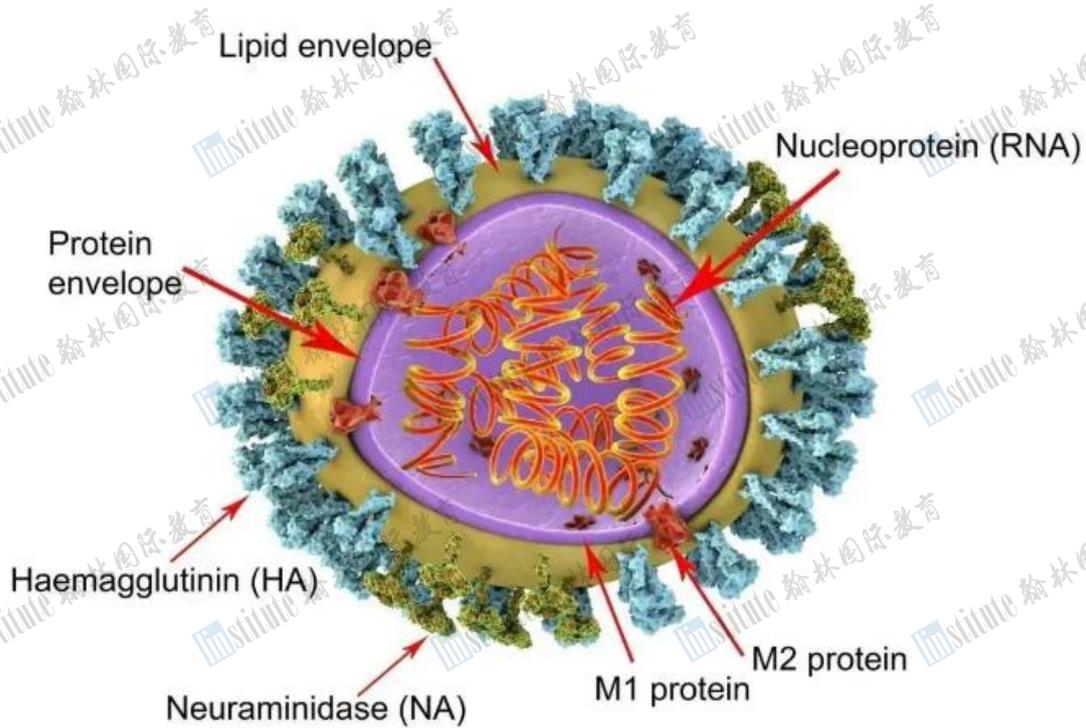
Anika Chebrolu 在采访时说：“在我小的时候，我爷爷总是鼓励我学习科学。他是一位化学教授。他总是告诉我学习所有关于科学的东西。随着时间的推移，我越来越喜欢科学。”



这也是 Anika Chebrolu 喜欢科学研究并参加 3M 青年科学家挑战赛 的原因。

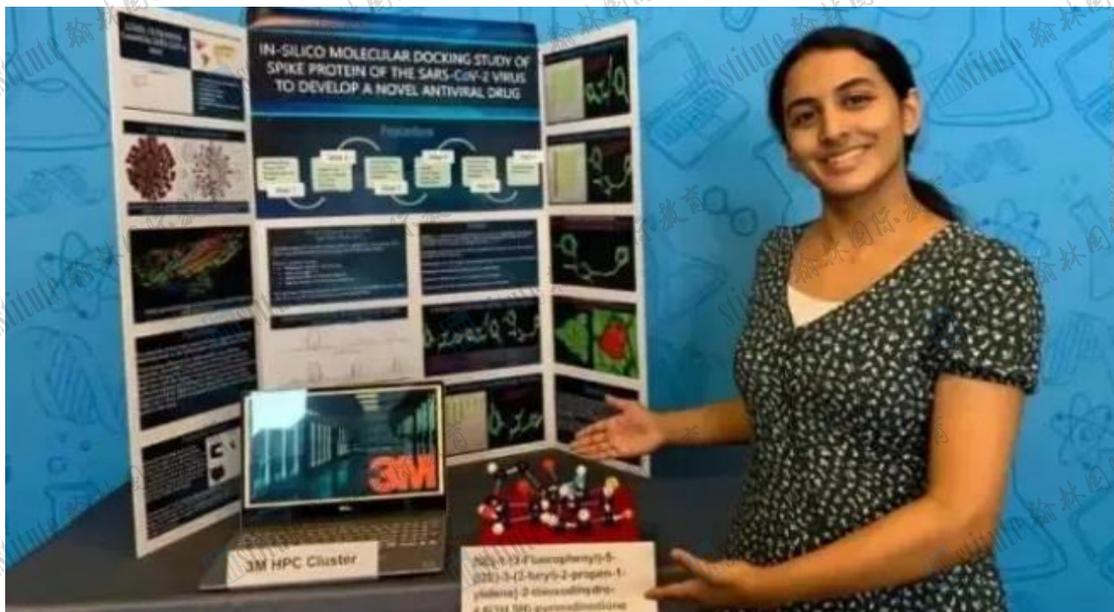


Anika Chebrolu 究竟做了怎样的研究？具体又得到什么结果呢？
这个项目，从病毒进入细胞的刺突蛋白——血凝素蛋白着手。



在病毒侵染细胞的时候，血凝素蛋白能够帮助病毒进入。如果抑制该蛋白，能够帮助阻隔病毒侵入细胞的第一阶段。

如果找不到治疗新冠病毒的特效药，那么从病毒的普遍特性入手，也是潜在的治疗方案。



而 Anika Chebrölu 的工作，便是选择找出了血凝素蛋白的最佳结合分子。研究的过程一共分为了以下几步：
先导步：

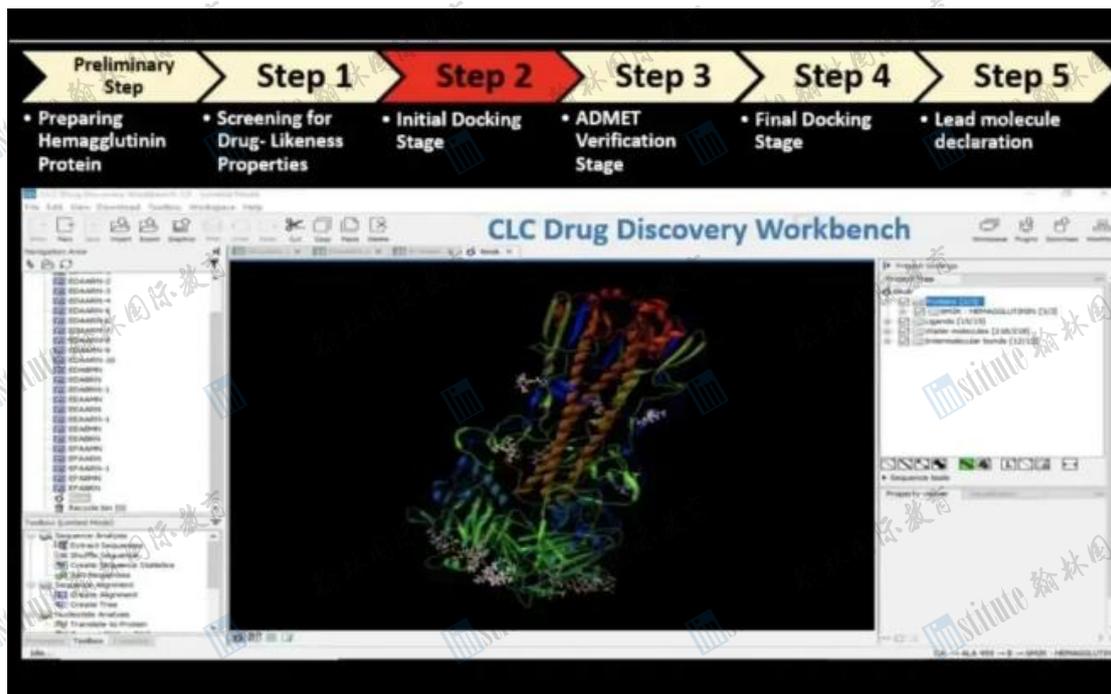
从 rcsb PDB 数据库下载了血凝素蛋白的文件,并用 FT map 工具分析了治疗热点,选取了下图位点。



第一步:
使用 ZINC database 中选取 250000 个分子。

The image shows a screenshot of the ZINC database interface. At the top, a navigation bar includes "Preliminary Step", "Step 1" (highlighted in red), "Step 2", "Step 3", "Step 4", and "Step 5". Below this, a list of steps is provided: "Preparing Hemagglutinin Protein", "Screening for Drug-Likeness Properties", "Initial Docking Stage", "ADMET Verification Stage", "Final Docking Stage", and "Lead molecule declaration". The main content area shows a search filter for "Molecular Weight (g/mol)" with a range of 50 to 500. To the right, a text box explains Lipinski's Rule of 5: "Lipinski's Rule of 5 is a set criteria used to determine compounds that have a good absorption and permeation in the biological systems. The set criteria is: molecular weight is under 500 g/mol, the value of LogP is lower than 5, and the molecule has utmost 5-H don't and 10 H-acceptor atoms."

第二步:
使用 CLC Drug Discovery Workbench 进行初步的分子对接,使用该软件寻找前 100 个对治疗热点亲和力最强的分子。



第三步：

使 admetSAR 测试 100 个结合分子，最后只有 6 个通过了测试。

A **Absorption** determines how the drug is absorbed by the body into the bloodstream through oral administration.

D **Distribution** is how the drug is carried out to the rest of the body via the bloodstream.

M **Metabolism** describes how the compounds breaks down.

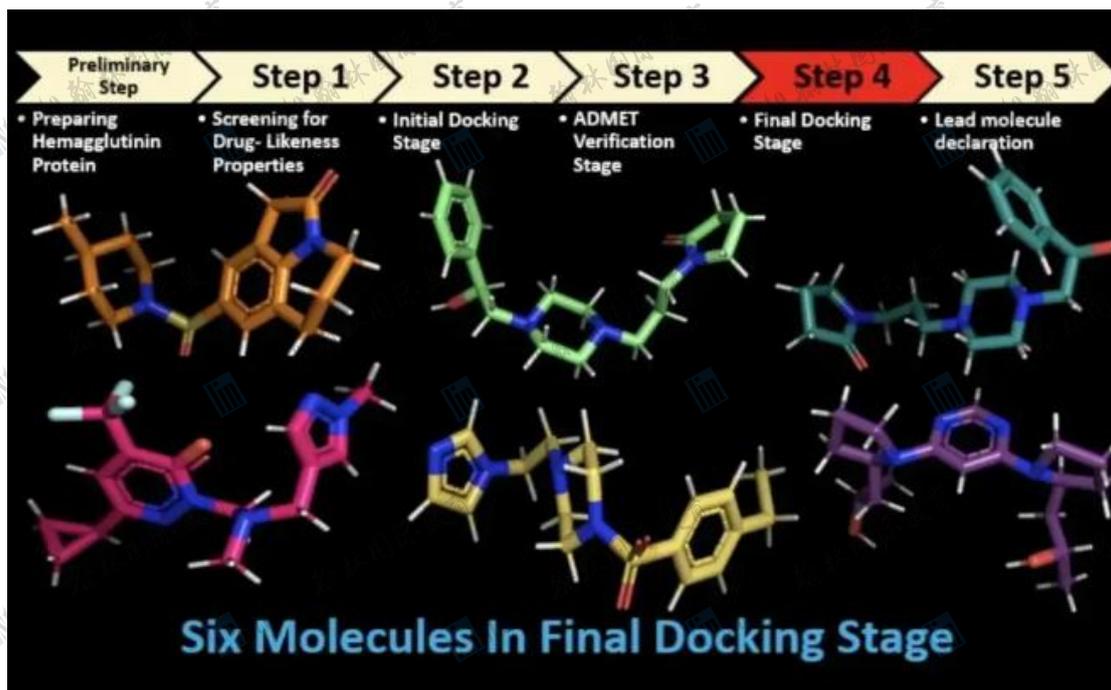
E **Excretion** is related to how the compound exits the body.

T **Toxicity** determines the potential harmfulness of the compound.

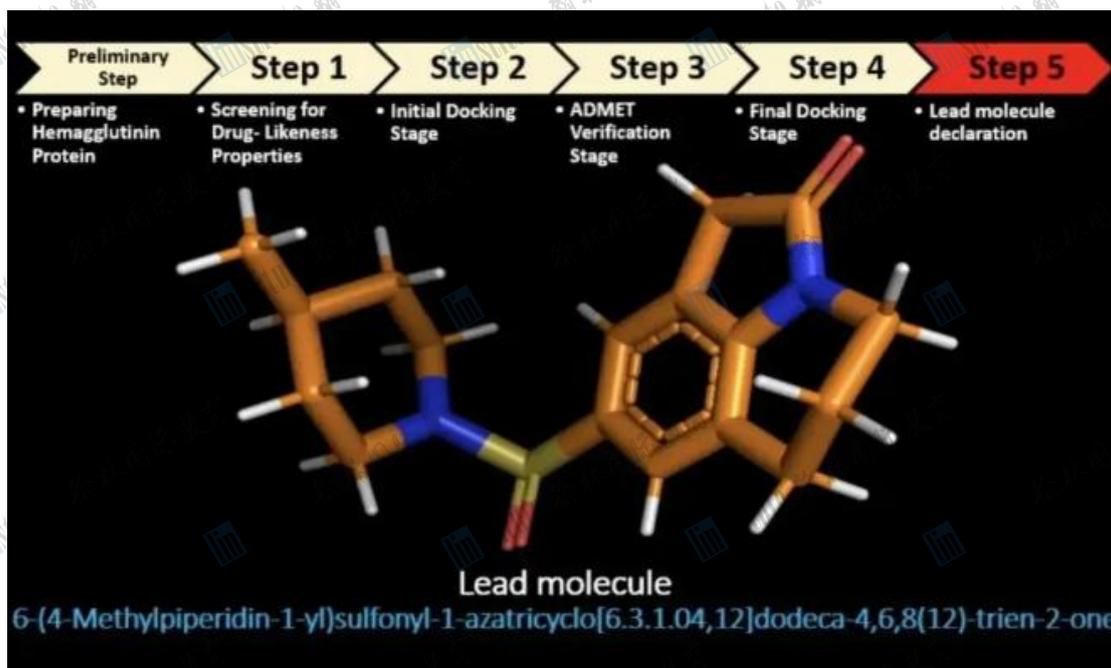
In this study, we tested for Blood Brain Barrier (BBB), Human Intestinal Absorption (HIA), Caco-2 permeability (Caco-2), carcinogenicity, and human ether-a-go-go-related gene inhibition (hERG)

第四步：

使用 Pyrex 软件对 6 个分子进行全面且深入的能量测试。



第五步：
最终发现亲和力最强的先导分子。



这种先导分子，可以选择性结合新冠病毒的突刺蛋白，或能成为新冠肺炎疗法。Anika Chebrolu 说，获得奖项和头衔是一种荣誉，但她的工作尚未完成。她的下一个目标是与科学家和研究人员一起努力，将她的研究发展为真正可行的治疗方法。



参考文献:

<https://www.newsindiatimes.com/americas-future-seven-indian-american-middle-schoolers-among-top-10-in-young-scientists-challenge/>
<https://www.youngscientistlab.com>
https://edition.cnn.com/2020/10/18/us/anika-chebrolu-covid-treatment-award-scn-trnd/index.html?utm_term=link&utm_source=twCNNi&utm_content=2020-10-19T16%3A45%3A07&utm_medium=social