Uniwersytet Wrocławski

Repozytorium

Plik pochodzi z repozytorium Wydziału Chemii Uniwersytetu Wrocławskiego

Zirconium-Based Metal–Organic Frameworks as Acriflavine Cargos in the Battle against Coronaviruses—A Theoretical and Experimental Approach

Autorzy

Przemysław J. Jodłowski

Klaudia Dymek

Grzegorz Kurowski

Jolanta Jaśkowska

Wojciech Bury

Marzena Pander

Sylwia Wnorowska

Katarzyna Targowska-Duda

Witold Piskorz

Artur Wnorowski

Anna Boguszewska-Czubara

Rok wydania

2022

Czasopismo

ACS Applied Materials and Interfaces

Numer woluminu

14

Strony

28615-28627

DOI

10.1021/acsami.2c06420

Kolekcja

Naukowa

Streszczenie

In this study, we present a complementary approach for obtaining an effective drug, based on acriflavine (ACF) and zirconium-based metal–organic frameworks (MOFs), against SARS-CoV-2. The experimental results showed that acriflavine inhibits the interaction between viral receptor-binding domain (RBD) of spike protein and angiotensin converting enzyme-2 (ACE2) host receptor driving viral cell entry. The prepared ACF@MOF composites exhibited low (MOF-808 and UiO-66) and high (UiO-67 and NU-1000) ACF loadings. The drug release profiles from prepared composites showed different release kinetics depending on the local pore environment. The long-term ACF release with the effective antiviral ACF concentration was observed for all studied ACF@MOF composites. The density functional theory (DFT) calculations allowed us to determine that π–π stacking together with electrostatic interaction plays an important role in acriflavine adsorption and release from ACF@MOF composites. The molecular docking results have shown that acriflavine interacts with several possible binding sites within the RBD and binding site at the RBD/ACE2 interface. The cytotoxicity and ecotoxicity results have confirmed that the prepared ACF@MOF composites may be considered potentially safe for living organisms. The complementary experimental and theoretical results presented in this study have confirmed that the ACF@MOF composites may be considered a potential candidate for the COVID-19 treatment, which makes them good candidates for clinical trials.

Słowa kluczowe

metal−organic frameworks, acriflavine, SARS-CoV-2, drug delivery, density functional theory calculations

Język

Angielski

Typ publikacji

Artykuł

Licencja otwartego dostępu

CC-BY

Licencja na prawach której można swobodnie kopiować, rozprowadzać, zmieniać i remiksować objęty prawem autorskim utwór (Utwór-przedmiot prawa autorskiego) pod warunkiem podania imienia i nazwiska autora utworu pierwotnego oraz źródła pochodzenia utworu.

Pełny tekst licencji:
https://creativecommons.org/licenses/by/3.0/pl/legalcode

Adres publiczny

http://dx.doi.org/10.1021/acsami.2c06420

Strona internetowa wydawcy

https://www.acs.org/content/acs/en.html

Plik został wygenerowany dnia 2026-11-09 09:08:31

Adres w repozytorium https://old.chem.uni.wroc.pl/pl/repozytorium/R6mXECL.