

عنوان مقاله:

مطالعه داکینگ مولکولی و ارزیابی خطر سمیت تعدادی از مشتقات جدید اکسیم اترهای بنزایمیدازول به عنوان مهارکننده های آنزیم سیتوکروم ۵۱

محل انتشار:

مجله علمی پژوهشی دانشگاه علوم پزشکی ایلام، دوره 26، شماره 6 (سال: 1397)

تعداد صفحات اصل مقاله: 12

نویسندگان:

ابوذر رویین تن - *Dept of Chemistry, Faculty of Science, University of Imam Hossein Officer and Guard Training, Tehran, Iran*

فاطمه فدایی نوبندگانی - *Dept of Food Industries, Faculty of Engineering, Fasa University, Fasa, Iran*

خلاصه مقاله:

مقدمه: آزول ها گروهی از ترکیبات ضد قارچ هستند که به دلیل پایین بودن سمیت، اثر بخشی بالاتر، دارای طیف گسترده ای از فعالیت می باشند. ارگسترول جزء اصلی غشای سلول قارچی است. مهار آنزیم لانسترول ۱۴ آلفا دمتیلاز باعث کاهش سنتز ارگسترول می شود. ارگسترول نقشی مانند هورمون در سلول های قارچ بازی می کند که رشد قارچ را تحریک می نماید. کار موثر آزول ها مهار رشد قارچ می باشد. در این مقاله مطالعات داکینگ روی تعدادی از مشتقات آزول با اثر مهارکنندگی آنزیم لانسترول ۱۴ آلفا دمتیلاز انجام و سپس خطر سمیت آن ها ارزیابی شد. مواد و روش ها: این پژوهش به شیوه توصیفی-تحلیلی انجام شد. برای بررسی نحوه اتصال مشتقات اکسیم اتر بنزایمیدازول به جایگاه فعال آنزیم، در ابتدا ساختار شیمیایی ترکیبات با استفاده از نرم افزار ChemBioDraw Ultra نسخه ۱۴ ترسیم شد. سپس به منظور بهینه سازی انرژی، به نرم افزار Hyperchem انتقال یافت. مطالعات داکینگ به وسیله نرم افزار Auto Dock-Vina-۱-۱-۲-win۳۲.msi انجام شد و نتایج با استفاده از نرم افزار مولگرو مورد آنالیز قرار گرفت. در مرحله نهایی ارزیابی خطر سمیت ترکیبات به وسیله برنامه OSIRIS انجام گردید. یافته های پژوهش: بر اساس نتایج به دست آمده از مطالعات داکینگ مهم ترین پیوندهای درگیر در اتصال دارو با گیرنده، کوئوردیناسیون حلقه آزول با پروتئین هم، پیوند هیدروژنی و اتصالات هیدروفوبیک می باشند. در میان تمام ترکیبات مورد مطالعه، بهترین نتایج داکینگ مربوط به ترکیب شماره ۱ (ترکیب حاوی هتروسیکل ایمیدازول) است. در حقیقت این ترکیب با منفی ترین سطح انرژی اتصال (۱۷/۹- کیلوکالری بر مول) تمایل بیشتری برای اتصال به آمینو اسیدهای کلیدی جایگاه فعال آنزیم ۵۱CYP دارد. بحث و نتیجه گیری: در پایان با توجه به نتایج به دست آمده از مطالعات داکینگ و ارزیابی خطر سمیت، می توان نتیجه گرفت که ترکیب شماره ۱ (ترکیب حاوی هتروسیکل ایمیدازول) در مقایسه با ترکیب مرجع فلوکونازول می تواند به عنوان مهارکننده موثرتر آنزیم ۵۱CYP مطرح شود.

کلمات کلیدی:

Molecular docking, Toxicity test, CYP51 inhibitors, Azoles, مهارکننده های ۵۱CYP، آزول ها

لینک ثابت مقاله در پایگاه سیویلیکا:

<https://civilica.com/doc/1322211>

