

عنوان مقاله:

بررسی بیوانفورماتیکی اثر ترکیبات نیمبین ، مالوالیک اسید ، زایلپیتول و اولئانولیک اسید در مهار آنزیم گلوکوزیل ترانسفراز به منظور درمان بیماری پوسیدگی دندان

محل انتشار:

نهمین همایش ملی مطالعات و تحقیقات نوین درحوزه زیست شناسی و علوم طبیعی ایران (سال: 1401)

تعداد صفحات اصل مقاله: 8

نویسنده:

فرزانه رحمتی - دانشجوی کارشناسی بیوتکنولوژی ، دانشگاه آزاد اراک ، مرکزی ، ایران

خلاصه مقاله:

مقدمه : پوسیدگی دندان یک بیماری چند عاملی و ماهیتا عفونی - میکروبی است که موجب حل شدن و تخریب بافت های آهکی دندان می شود. این مطالعه قصد دارد با هدف بررسی بیوانفورماتیکی اثر ترکیبات نیمبین ، مالوالیک اسید ، زایلپیتول ، اولئانولیک اسید در مهار آنزیم گلوکوزیل ترانسفراز که در بیماری پوسیدگی دندان نقش دارد در جهت معرفی ترکیبات موثر در درمان این بیماری گامی بردارد. روش ها: در این مطالعه برای بررسی نحوه ی اتصال ترکیبات به جایگاه فعال آنزیم ، ترسیم ساختار شیمیایی ترکیبات ، بهینه سازی انرژی ، مطالعات داکینگ و تجزیه و تحلیل های نهایی به ترتیب از سرور آنلاین H Dock و نرم افزار های Hyperchem, Chimera Discovery و سرور Pdb Sum Generate استفاده شد. یافته ها: ترکیبات مورد مطالعه قادر به اشغال جایگاه فعال آنزیم می باشند و سطح انرژی اتصال در نیمبین ۱۰۲۰۶- ، در مالوالیک اسید ۵۱۲۰۷- ، در زایلپیتول ۳۲۰۱۱۳- و در اولئانولیک اسید ۶۵۰۱۸۸- بود. نتیجه گیری : با توجه به اثربخشی ترکیبات در مطالعه بیوانفورماتیکی ، برای بررسی های تکمیلی می توان اثر این ترکیب ها را در شرایط in vitro و in vivo مورد آنالیز قرار داد.

کلمات کلیدی:

آنزیم گلوکوزیل ترانسفراز ، داکینگ مولکولی ، پوسیدگی دندان ، ترکیبات موثر

لینک ثابت مقاله در پایگاه سیویلیکا:

<https://civilica.com/doc/1567019>

