

عنوان مقاله:

بررسی ترکیبات شیمیایی گیاه بومادران به منظور شناسایی کاندید دارویی ضدالتهاب با روش غربالگری مجازی و داکینگ مولکولی

محل انتشار:

اولین همایش ملی شیمی و گیاهان دارویی (سال: 1401)

تعداد صفحات اصل مقاله: 19

نویسندگان:

پریسا ایمنی - کارشناسی ارشد زیستفناوری صنعت و محیط زیست، دانشکده علوم و فنون نوین، دانشگاه تهران

میلاد درجه - مدیر دپارتمان تحقیق و توسعه شرکت زر عطار نوین فارمد ایرانیان

خلاصه مقاله:

التهاب به عنوان یکی از اصلی ترین مکانیسم های دفاعی سیستم ایمنی بدن در شرایط طبیعی، در صورت اختلال در مسیر های کنترلی تنظیمی می تواند به حالت مزمن تبدیل شده و باعث ایجاد بیماری های مزمن از جمله دیابت، سندرم متابولیک، بیماری قلبی عروقی، سرطان، آرتریت روماتوئید، بیماری التهابی روده، آسم و بیماری انسدادی مزمن ریه شود. بنابراین کنترل این فرایند توسط مهار آنزیم های شرکت کننده در مسیر التهاب می تواند به عنوان مکانیسم اصلی عملکرد داروهای ضد التهاب در نظر گرفته شود. داروهای ضدالتهابی شامل دو دسته اصلی داروهای استروئیدی و غیر استروئیدی می باشند. با افزایش آگاهی در رابطه با وجود عوارض داروهای شیمیایی، مطالعات اکتشاف داروهایی با منشا گیاهی و طبیعی افزایش پیدا کرده است. گیاه بومادران، به عنوان یک گیاه بومی ایران با ترکیبات شیمیایی منحصر به فرد خود می تواند به عنوان یک منبع بالقوه جهت مهار آنزیم های درگیر در مسیر التهاب در نظر گرفته شود. در این پژوهش ترکیبات شیمیایی گیاه بومادران به روش کروماتوگرافی گازی/ طیف سنجی جرمی شناسایی شده و به بررسی اثر این ترکیبات در مهار برخی از آنزیم های اصلی مسیر التهاب از جمله سیکلواکسیژناز های ۱، ۲ و لیبواکسیژناز ۵، در سطح غربالگری مجازی و اکتشاف دارو توسط روش های بیوانفورماتیک، کموانفورماتیک و داکینگ مولکولی پرداخته شد. ترکیب Camphor برای آنزیم COX_۱، نسبت به مهارکننده انتخابی ناپروکسن دارای ۶۳ درصد فعالیت مهارکنندگی، برای آنزیم COX_۲ دارای ۵۰ درصد فعالیت مهارکنندگی و برای آنزیم ۵_ALOX، دارای ۶۹ درصد فعالیت مهارکنندگی می باشد که با توجه به درصد بالای این ترکیب در عصاره بومادران، اعداد قابل توجهی هستند. نتایج کلی این مطالعات نشان داد که ترکیبات گیاه بومادران با اثر مهارکنندگی قابل توجه نسبت به داروهای ضدالتهابی مورد استفاده، می توانند به عنوان منبع طبیعی داروهای گیاهی ضد التهاب در نظر گرفته شوند.

کلمات کلیدی:

بومادران؛ التهاب؛ سیکلواکسیژناز؛ لیبواکسیژناز؛ غربالگری مجازی؛ داکینگ مولکولی

لینک ثابت مقاله در پایگاه سیویلیکا:

<https://civilica.com/doc/1705869>

