

## عنوان مقاله:

مطالعه دینامیک مولکولی در برهمکنش دارو گالانتامین و پروتئین استیل کولین استراز

## محل انتشار:

ششمین کنگره ملی شیمی و نانو شیمی از پژوهش تا توسعه ملی (سال: 1402)

تعداد صفحات اصل مقاله: 13

## نویسندگان:

زهرا کشاورز - گروه شیمی - دانشکده شیمی و مهندسی شیمی - دانشگاه تحصیلات تکمیلی صنعتی و فناوری پیشرفته - کرمان-ایران

مهدی یوسفیان - گروه شیمی - دانشکده شیمی و مهندسی شیمی - دانشگاه تحصیلات تکمیلی صنعتی و فناوری پیشرفته - کرمان-ایران

اسدالله حسن خانی - گروه پژوهشی موادنو- پژوهشکده مهندسی مواد - دانشگاه تحصیلات تکمیلی صنعتی و فناوری پیشرفته - کرمان-ایران

## خلاصه مقاله:

بیماری آلزایمر AD توسط دانشمند آلمانی به نام آلوویس آلزایمر در سال ۱۹۰۷ کشف و نام گذاری شده است. آلزایمر یک بیماری عصبی پیشرونده است که درجهان تقریباً ۴۷ میلیون نفر به آن مبتلا هستند. این بیماری بر مغز تاثیر می گذارد و باعث کوچک شدن مغز (آتروفی) و سپس مرگ سلول های مغز می شود که از دست رفتن حافظه و نیروی شناخت را به دنبال خواهد داشت. پیش بینی می شود که تا قبل از سال ۲۰۵۰ به میزان ۶۲ درصد این بیماری افزایش یابد. علائم این بیماری ابتدا خفیف است اما به مرور شدیدتر می شود. بیماری آلزایمر شایع ترین علت زوال عقل است و کاهش مداوم درمهارت های تفکر، رفتار و اجتماعی که بر توانایی فرد برای عملکرد مستقل تاثیر می گذارد. یکی از داروهای مقابله با بیماری آلزایمر، گالانتامین است. گالانتامین برای اولین بار توسط شیمیدان بلغاری و همکارانش در سال ۱۹۵۶ از پیازهای برفی معمولی جدا شد. در میان استیل کولین استراز موجود، گالانتامین تنها ماده طبیعی است که از ماده فعال استخراج، شناسایی و مورد مطالعه قرار گرفت. گالانتامین یک ترکیب شیمیایی است که برای درمان اختلالات شناختی در بیماری هایی مانند آلزایمر خفیف و متوسط، دمانس، HAND و سایر اختلالات حافظه استفاده می شود. داروهای در بردارنده گالانتامین با نام های تجاری نیوالین، رازادین و رامینیل تولید می شوند. هدف اصلی این تحقیق بررسی عملکرد Galantamine به عنوان مهارکننده ی آنزیم استیل کولین استراز با استفاده از نرم افزار دینامیک مولکولی است. انجام این کار، اطلاعات با ارزشی برای طراحی یک مهارکننده که بتواند در برابر تمامی ترکیب های جهش یافته آلزایمر موثر و کارآمد باشد در اختیار ما می گذارد.

## کلمات کلیدی:

آلزایمر، گالانتامین، نیوالین، رازادین، رامینیل، استیل کولین استراز، دینامیک مولکولی

## لینک ثابت مقاله در پایگاه سیویلیکا:

<https://civilica.com/doc/1766882>

