

## عنوان مقاله:

مطالعه برهم کنش سه مشتق از عصاره گیاه شیرین بیان با آنزیم بوتیریل کولین استراز موثر در آلزایمر به روش مدل سازی مولکولی

## محل انتشار:

دومین همایش ملی گیاهان دارویی، کارآفرینی و تجاری سازی (سال: 1402)

تعداد صفحات اصل مقاله: 7

## نویسندگان:

صفا کریمی نخعی - دانشجوی کارشناسی ارشد بیوشیمی، گروه زیست شناسی، دانشکده علوم پایه، دانشگاه حکیم سبزواری

سکینه کاظمی نورعینی - دانشیار بیوشیمی، گروه زیست شناسی، دانشکده علوم پایه، دانشگاه حکیم سبزواری

محمد رضا بزرگمهر - دانشیار شیمی فیزیک، گروه شیمی، واحد مشهد، دانشگاه آزاد اسلامی، مشهد، ایران

## خلاصه مقاله:

گیاه شیرین بیان همواره به دلیل خواص دارویی متعددی در طب سنتی باستان مورد توجه قرار گرفته است. شواهد تجربی نشان داده است ترکیبات موجود در عصاره ی شیرین بیان بر بیماری آلزایمر موثر است با این حال، مکانیسم عمل آنها مشخص نیست. آنزیم بوتیریل کولین استراز نقش موثری در مکانیسم مولکولی آلزایمر دارد. در این مطالعه، تاثیر متقابل ۳ مشتق از عصاره گیاه شیرین بیان با آنزیم بوتیریل کولین استراز با استفاده از روش داکینگ مولکولی بررسی شد. ساختار لیگاندهای مورد مطالعه با استفاده از روش تئوری تابعی چگالی B3LYP و مجموعه پایه ۶-۳۱G بهینه شدند. با محاسبه نمودار مثلثی دلونی / ورونوی مراکز اتمی، حفرهها و منافذ ساختار آنزیم به دست آمدند. بر اساس نتایج به دست آمده، آنزیم بوتیریل کولین استراز دارای ۹ کانال و ۱۲ منفذ است. کانالی که عمق آن ۲۴ Å و حجم آن ۵۸,۹۹۰ Å<sup>3</sup> است، عمیق ترین کانال است و خاصیت غیرقطبی دارد. برهمکنش ۳ لیگاند بهینه شده با آنزیم به وسیله روش داکینگ سرتاسری انجام شد. انرژی اتصال لیگاندها به آنزیم و دنباله هایی که در برهم کنش آنها دخیل هستند، به دست آمد. نتایج نشان می دهد که لیگاند ۲- (۴-متوکسی فنیل) -۷- (۳-متیل بوت-۲-ان-۱-ایل) اکسی (کرومان-۴-وان بیشترین افینیتیه اتصال به آنزیم را دارد. نتایج داکینگ نشان می دهد که برهمکنش لیگاندها عمدتاً از طریق کانالهایی که با مرکز فعال آن آنزیم مرتبط است، انجام می شود و به صورت مستقیم با دنباله هایی که مرکز فعال را تشکیل می دهند، برهم کنش ندارند. ماهیت برهمکنش لیگاند عمدتاً هیدروفوب است.

## کلمات کلیدی:

آلزایمر، هیدروفوبیک، لیگاند، داکینگ، آنزیم

لینک ثابت مقاله در پایگاه سیویلیکا:

<https://civilica.com/doc/2007096>

