

عنوان مقاله:

بررسی داکینگ مولکولی ترکیبات موثره گیاه دارویی هلپه (Teucrium polium) به عنوان مهارکننده مالتاز-گلوکوآمیلاز به منظور درمان بیماری دیابت نوع ۲

محل انتشار:

دومین همایش بین المللی زیست شناسی و علوم آزمایشگاهی (سال: 1402)

تعداد صفحات اصل مقاله: 6

نویسنده:

میلاذ احمدی - گروه شیمی، دانشکده علوم، دانشگاه شهید چمران اهواز، ایران

خلاصه مقاله:

مقدمه: مهارکننده مالتاز-گلوکوآمیلاز، یک دسته داروی ضد دیابت است که برای کنترل سطح قند خون در بیماران دیابت نوع ۲ استفاده میشود. این دارو با کاهش فعالیت آنزیم مالتاز-گلوکوآمیلاز، که مسئول تجزیه و هضم کربوهیدراتها در دستگاه گوارش است، به کنترل سطح قند خون کمک میکند. تحقیقات نشان داده است که مصرف مهارکننده مالتاز-گلوکوآمیلاز در بیماران دیابت نوع ۲ میتواند به کاهش سطح قند خون پس از وعده های غذایی کمک کند. هدف از این مطالعه بررسی اثر مهارکنندگی برخی از ترکیبات موثره گیاه دارویی هلپه (Teucrium polium) در برابر آنزیم مالتاز-گلوکوآمیلاز بعنوان یک هدف دارویی مناسب برای درمان بیماری دیابت نوع ۲ با استفاده از مطالعه داکینگ مولکولی توسط نرم افزار Molegro virtual docker است. مواد و روشها: ابتدا فایل ساختار سهبعدی پروتئین با فرمت ۳CTT.pdb آنزیم مالتاز-گلوکوآمیلاز انسانی انتخاب شد و از بانک اطلاعات پروتئین RCSB دانلود گردید و توسط نرمافزار گرومکس بهینه شد. در گام بعدی فایل ساختار سهبعدی تمامی ترکیبات مورد مطالعه در این پژوهش از پایگاه داده PubChem دانلود گردید و با کمک نرمافزار آوگادرو بهینه سازی شدند. در ادامه ابتدا فایل لیگاند و سپس آنزیم به فرمت pdb وارد نرم افزار Molegro virtual docker شدند و ارزیابی انرژی اتصال (ΔG) انجام گردید. بحث: تمامی ترکیبات موثره گیاه هلپه به جز ترکیب آلفا پنین توانستند انرژی اتصال بالاتری نسبت به داروی متفورمین را کسب کردند. نتیجهگیری: نتایج این تحقیق میتواند در توسعه داروهای درمان دیابت نوع دوم با استفاده از ترکیبات موثره گیاه هلپه راهگشا باشد.

کلمات کلیدی:

هلپه، ضد دیابت، مالتاز گلوکوآمیلاز، داکینگ مولکولی، مولگرو ویرچوال داکر.

لینک ثابت مقاله در پایگاه سیویلیکا:

<https://civilica.com/doc/1903295>

