



ارزو ذوالفقاری، ۱۴۰۲

## مطالعه‌ی بیو انفورماتیکی ترکیبات اسانس گوش بره سفید درمهار آنزیم آلفاگلوکوزیداز به منظور درمان بیماری دیابت

مهارکننده‌های؟- گلوکوزیداز با مداخله در هضم کربوهیدرات‌ها در کنترل بیماری دیابت نقش دارند  
phlamis Cancellata یا گوش بره سفید از خانواده‌ی نعناعیان می‌باشد. اسانس این گیاه دارای فنلهایی  
مثل تیمول، کارواکرول،

سیمن، لینا لول، پینن می باشد. هدف از این مطالعه، بررسی اثر مهار کنندگی مشتقات موجود در عصاره‌ی  
گوش بره سفید بر دیابت یک اختلال متابولیسمی بدن ناشی از علل چندگانه است که با افزایش مزمن قند  
خون، همراه با اختلال در متابولیسم کربوهیدرات، پروتئین و چربی نمایان می‌شود که این اختلال ناشی از  
نقص در ترشح انسولین پ (دیابت نوع یک) و یا نقص در عملکرد انسولین (دیابت نوع دو) و یا هر دو است.  
قند خون بالا ناشی از دیابت کنترل نشده منجر به آسیب‌های جدی به بسیاری از سیستم‌های بدن، به  
خصوص اعصاب و عروق خونی می‌شود. مبتالیان به دیابت نوع یک توانایی تولید انسولین را ندارند و این امر  
موجب افزایش قند خون می‌گردد. در دیابت نوع دو گیرنده‌های سلولی فرد نسبت به انسولین مقاوم شده‌اند  
و در واقع مانع از ورود انسولین به داخل سلولها و انجام اعمال طبیعی آن می‌شوند.  
**کلیدواژه‌ها:** فعالیت آنزیم - گلوکوزیداز به روش داکینگ مولکولی می‌باشد.

شماره‌ی پایان‌نامه: ۱۲۷۴۲۹۷۰۷۹۰۴۱۲۱۱۱۱۰۱۷۱۶۲۶۷۸۷۰۰

تاریخ دفاع: ۱۴۰۲/۱۱/۱۸

رشته‌ی تحصیلی:

دانشکده:

استاد راهنما: دکتر سیدهاشم اخلاقی

### **Thesis:**

## Is of the Effect of Phlomis cancellata on Alphaglucoisidase Enzyme inhibition for treating diabetes

Active plant substances play a fundamental role in drug discovery, especially for cancer and infectious diseases. In this research, we have investigated the inhibitory power of the compounds extracted from the mass of Ponsai for the treatment of diabetes using Autodoc Tools, Yasara and Ligaplot software. In the first part of this work, the inhibitory power of essential oil compounds extracted from Ponsai plant on the active site of alpha-glucosidase enzymes for the treatment of diabetes was performed. The best inhibitor for alpha-



glucosidase enzyme was delta-cadinene with a binding energy of -18.7 kcal/mol. Hydrophobic and hydrogen bonds with the active site and stability of the protein-ligand complex by solvent molecules play a significant role in inhibiting enzymes. The inhibition of delta-cadinene was higher compared to the drug metformin, which is currently used to treat diabetes. The binding energy of metformin drug, which was investigated by molecular docking method like essential oil compounds, was -6.63. Also, compounds of gamma-elmen, Germkeren D, beta-caryophyllene, beta-bourbonene and alpha-humulene had higher binding energy than metformin