



University of Isfahan

May ۲۰۲۳



دانشگاه اصفهان

اردیبهشت ۱۴۰۲



## بررسی پارامترهای لیپینسکی و خاصیت ضد انگلی ترکیب مشتق شده از فلاونوئید گیاهی پینوستروبین

مأده فدائی<sup>۱</sup>، عزیزه اسدزاده<sup>۲\*</sup>

۱- کارشناسی زیست شناسی سلولی مولکولی، گروه زیست شناسی، دانشکده علوم پایه، مؤسسه آموزش عالی نور دانش، میمه، اصفهان، ایران

۲- دکترای بیوشیمی، گروه زیست شناسی، دانشکده علوم پایه، مؤسسه آموزش عالی نور دانش، میمه، اصفهان، ایران

Az.asadzadeh@yahoo.com

**بیان مسأله:** انگل لیشمانیا دارای آنزیم حیاتی N-مریستوئیل ترانسفراز است که نقش و اهمیت آن در مکانیسم های بیولوژیکی این انگل می باشد و باعث انتقال اسید چرب اشباع مریستات از myristoyl-coA به انتهای آمینی گلیسین در جایگاه اتصال پروتین می شود. دارو های ضد انگلی های خاص خودشان را مورد هدف قرار می دهند، فلاونوئید زیست فعال پینوستروبین به دلیل خواص دارویی برجسته خود توجهات را به خودش جلب کرده است در این پژوهش پارامتر های لیپینسکی و خاصیت ضد انگلی ترکیب مشتق شده از پینوستروبین در مهار آنزیم N-مریستوئیل ترانسفراز بررسی میشود.

**هدف پژوهش:** در این مطالعه، برای بررسی پیوند های هیدروژنی و سطح انرژی در ابتدا ساختار شیمیایی مولکول مورد بررسی تعیین شد و پس از بهینه سازی انرژی، مطالعات داکینگ و تجزیه تحلیل خصوصیات فیزیکوشیمیایی و پارامتر های لیپینسکی با استفاده از سرورهای آنلاین انجام گرفت.

**روش و چگونگی انجام پژوهش:** در تحقیقات بسیاری برای کنترل لیشمانیا، آنزیم ان-مریستوئیل ترانسفراز مورد هدف قرار داده شده است، نتایج حاصل از داکینگ لیگاند با آنزیم ان-مریستوئیل ترانسفراز نشان داد که سطح انرژی ترکیب موردنظر - ۱۸۵٫۴۸ می باشد. میزان انحلال در آب ترکیب زیاد بوده و جذب بالای معده ای دارد.



University of Isfahan

May ۲۰۲۳



دانشگاه اصفهان

اردیبهشت ۱۴۰۲



یافته ها و نتیجه گیری: با توجه به نتایج قابل پذیرش داکینگ، خصوصیات فیزیکوشیمیایی و فارماکوکینتیکی مولکول ۵-  
-methyl-pinostrobin<sup>۷</sup>O-Acetyl- می توان این ترکیب را جهت بررسی های بیشتر آزمایشگاهی مورد هدف و ارزیابی  
قرار داد.

کلید واژه ها: . ضد انگل، لیشمانیا، مهار آنزیم، پارامترهای لیپینسکی، pinostrobin



University of Isfahan

May ۲۰۲۳



دانشگاه اصفهان

اردیبهشت ۱۴۰۲



## Investigation of Lipinski parameters and antiparasitic properties of compound derived from plant flavonoid pinostrobin

Maedeh Fadaie <sup>۱</sup>, Azizeh Asadzadeh <sup>۱\*</sup>

- <sup>۱</sup> - Bachelor of Molecular Cell Biology, Department of Biology, Faculty of Basic Sciences, Noor Danesh Institute of Higher Education, Meimeh, Isfahan, Iran
- <sup>۲</sup> - PhD in Biochemistry, Department of Biology, Faculty of Basic Sciences, Noor Danesh Institute of Higher Education, Meimeh, Isfahan, Iran

[Az.asadzadeh@yahoo.com](mailto:Az.asadzadeh@yahoo.com)

**Statement of Problem:** Leishmania parasite has a vital enzyme N-myristoyl transferase, which plays a role and importance in the biological mechanisms of this parasite and causes the transfer of saturated fatty acid myristate from myristoyl-coA to the amino glycine end at the protein binding site. Antiparasitic drugs target their specific parasites, the bioactive flavonoid pinostrobin has attracted attention due to its outstanding medicinal properties. In this research, Lipinski's parameters and the antiparasitic properties of the compound derived from pinostrobin in inhibiting the enzyme N - Myristoyl transferase is checked.

**Research Purpose:** In this study, to check the hydrogen bonds and energy level, the chemical structure of the investigated molecule was first determined, and after energy optimization, docking studies and analysis of physicochemical properties and Lipinski parameters were performed using online servers.

**Research Method:** In many researches to control Leishmania, N-myristoyl transferase enzyme has been targeted, the results of docking ligand with N-myristoyl transferase enzyme showed that the energy level of the desired compound is -۱۸۵, ۴۸. The dissolution rate of the compound in water is high and it has a high gastric absorption.



University of Isfahan

May ۲۰۲۳



دانشگاه اصفهان

اردیبهشت ۱۴۰۲



**Results and Conclusion:** According to the acceptable results of docking, physicochemical and pharmacokinetic properties of  $\alpha$ -O-Acetyl- $\gamma$ -methyl-pinostrobin molecule, this compound can be targeted and evaluated for further laboratory investigations.

**Keywords:** Antiparasitic, Leishmania, enzyme inhibition, Lipinski parameters, pinostrobin