

بِسْمِ اللَّهِ الرَّحْمَنِ الرَّحِيمِ



مدیریت تحصیلات تکمیلی

دانشکده علوم پایه

گروه شیمی

پایان نامه جهت اخذ درجه کارشناسی ارشد در رشته شیمی تجزیه

مطالعه تجربی و نظری تاثیر یک پلیمر فلزی تری هترو بر آنزیم کاتالاز کبد گاو

اساتید راهنما:

دکتر فرشته شیری

دکتر سمیه شهرکی

استاد مشاور:

دکتر زهره رزم آرا

تهیه و تدوین:

نرگس لشکرزاده

تابستان ۱۴۰۲

چکیده:

اتصال مولکول‌های کوچک مانند داروها به مولکول‌های زیستی نقش مهمی در توزیع و اثربخشی آنها در سیستم‌های زیستی ایفا می‌کند. براین اساس، در این تحقیق کمپلکس سه‌هسته‌ای $[Cu_{0.152} Mn_{0.848}(\mu-dipic)_2\{Na_2(\mu-H_2O)_4\}]_n \cdot nH_2O$ (dipic = پیریدین-۲،۶-دیکربوکسیلاتو) انتخاب و تاثیر آن بر ساختار و عملکرد آنزیم کاتالاز کبد گاو (BLC) با استفاده از روش‌های طیف‌سنجی و الحاق نمودن مولکولی مورد ارزشیابی قرار گرفت. در این مطالعه پارامترهای مختلفی مانند ثابت پیوند، نوع برهمکنش، پارامترهای ترمودینامیکی و نوع خاموش‌سازی فلورسانس در سه دمای ۳۰۳، ۳۱۰ و ۳۱۷ کلوین بررسی شد. کمپلکس سه هسته‌ای توانست فعالیت کاتالیزوری آنزیم را بهبود دهد. نتایج مطالعات طیف‌سنجی تایید کرد که کمپلکس قادر به خاموش‌سازی نشر ذاتی پروتئین از طریق مکانیزم ایستاتیک و تشکیل پیوندهای هیدروژنی و برهمکنش‌های واندوالسی با کاتالاز است. پیوند کمپلکس تا حدودی منجر به تغییرات ساختاری در کاتالاز شده است. مطالعات الحاق نمودن مولکولی برای بررسی جایگاه اتصال کمپلکس در کاتالاز استفاده شد. در انتها فعالیت آنتی‌اکسیدانی کمپلکس با استفاده از رادیکال آزاد DPPH بررسی و نشان داد که کمپلکس سه هسته‌ای نسبت به بسیاری از کمپلکس‌های فلزی قابلیت بالاتری در مهار رادیکال‌های آزاد دارد.

کلمات کلیدی: کمپلکس‌های فلزی پلیمری، کاتالاز، داروهای فلزی، مکانیزم برهمکنش، الحاق مولکولی

Abstract

The binding of small molecules such as drugs to biological molecules plays an important role in their distribution and effectiveness in biological systems. Therefore, in this research trinuclear complex $[\text{Cu}_{0.152} \text{Mn}_{0.848}(\mu\text{-dipic})_2\{\text{Na}_2(\mu\text{-H}_2\text{O})_4\}]_n \cdot n\text{H}_2\text{O}$ (dipic = pyridine-2,6-dicarboxylato) was selected and its effect on the structure and function of bovine liver catalase (BLC) was evaluated using spectroscopic and molecular docking methods. In this study, various parameters such as binding constant, type of interaction, thermodynamic parameters and type of fluorescence quenching were investigated at three temperatures of 303, 310 and 317 K. The trinuclear complex could improve the catalytic activity of the enzyme. The results of spectroscopic studies confirmed that the complex is able to turn off the intrinsic fluorescence of protein through static mechanism and formation of hydrogen bonds and van der Waals interactions with catalase. Complex binding has led to some structural changes in catalase. Molecular docking studies were used to investigate the binding site of the complex in catalase. Finally, the antioxidant activity of the complex was investigated using the DPPH free radical and showed that the trinuclear complex has a higher ability to inhibit free radicals than many metal complexes.

Keywords: Polymeric Metal Complexes, Catalase, Metallodrugs, Interaction Mechanism, Molecular Docking



University of Zabol
Graduate school
Faculty of Science
Department of Chemistry

The Thesis Submitted for the Degree of M.Sc (in the field of Analytical
Chemistry)

**Experimental and theoretical study on the impact of a tri-
hetero metallic polymer on bovine liver catalase enzyme**

Supervisors:

Dr. F. Shiri
Dr.S. Shahraki

Advisor:

Dr. Z. Razmara

By:

N.Lashkarzadeh

Summer 2023