

Istraživanje aktivnosti galantamina i norgalantamina u uklanjanju radikala pomoću teorije funkcionala gustine (DFT)

Tekući naslov: Računarske studije o galantaminu i norgalantaminu

Veronika Karadžova¹, Lučano Saso², Biljana Arsić³, Živko Velkov^{4*}

1-Univerzitet za hemijsku tehnologiju i metalurgiju, bulevar Klimenta Ohridskog 8, 1756 Sofija, Bugarska

2-Univerzitet Sapienza u Rimu, Odeljenje za fiziologiju i farmakologiju, Rim, Italija

3-Univerzitet u Nišu, Prirodno-matematički fakultet, Departman za hemiju, Višegradska 33, 18000 Niš, Republika Srbija

4- Jugozapadni univerzitet „Neofit Rilski“, Prirodno-matematički fakultet, Departman za hemiju, 2700-Blagoevgrad, ul. Ivan Mihajlov 66, Bugarska

Sažetak

Galantamin, prirodni alkaloid sa inherentnim antioksidativnim svojstvima, efikasno prelazi krvno-moždanu barijeru, što ga čini obećavajućim terapijskim sredstvom za lečenje određenih poremećaja povezanih sa mozgom kod ljudi. Ova studija teorije funkcionala gustine (DFT) predstavlja rezultate kvantno-hemijskih proračuna entalpija disocijacije galantaminovih O-H i C-H veza, razjašnjavajući njegove aktivnosti uklanjanja radikala. Rezultati ističu sklonost galantamina ka interakciji sa radikalima u biološkim sistemima, naglašavajući jačinu veze i kiselost njegovih O-H i C-H grupa. Pored toga, studija istražuje implikacije apstrakcije hidridnih jona, bacajući svetlo na njegovu potencijalnu reaktivnost i antioksidativne mehanizme.

Ključne reči: galantamin, norgalantamin, aktivnost uklanjanja radikala, DFT proračuni