



دانشکده علوم

## اطلاعیه برگزاری جلسه دفاع از رساله کارشناسی ارشد

گروه زیست شناسی - گرایش فیزیولوژی جانوری

طیبه مباشر قاسمی - شماره دانشجویی ۹۴۵۳۷۴۰۰۳

عنوان پایان نامه:

مرور سازمان یافته اثرات فیتوکانابینوئیدها بر سرطان پروستات: تکمیل شده با بررسی های درون رایانه ای و داکینگ ملکولی

Thesis Title:

Systematic review on the effects of phytocannabinoids on prostate cancer: complemented with in silico investigation and molecular docking.

مکان: کلاس ارشد

تاریخ دفاع: ۹۶/۱۰/۲۷ - ساعت ۹ صبح

اعضای کمیته دفاع از پایان نامه (شامل استادان راهنما، مشاور، داور و نماینده تحصیلات تکمیلی)			
ردیف	نام و نام خانوادگی	مرتبه علمی	سمت
۱	نامدار یوسفوند	استادیار	استاد راهنما
۲	اسحق کریمی	استادیار	استاد راهنما
۳	هادی حجاریان	استادیار	داور
۴	خسرو چهری	استادیار	داور

چکیده:

در این پایان نامه به بررسی اثرات درمانی فیتوکانابینوئیدها بر سرطان پروستات می پردازیم. برای این بررسی از روشهای غربالگری *in silico* و محاسبات درون رایانه ای استفاده می شود. برای این کار ابتدا ساختار کریستالوگرافی پروتئینهای هدف و ساختار ترکیبات درمانی دانلود گردیده و سپس با استفاده از نرم افزارهای مربوطه عملیات داکینگ ملکولی انجام میگردد.

نتایج مربوطه به شکل میزان تمایل اتصال لیگاند-پروتیین بررسی میگردد و ترکیباتی که دارای افیونیتی مناسبتر هستند انتخاب و معرفی میگردند. در این بررسی ترکیبات Delta-9-Cis-tetrahydro cannabinol(Cis-THC) و Cannabinol(CBN) دارای بهترین حالت افینیتی و تمایل اتصال بودند که در اکثر پروتیینها مشترک بودند. بنابر این میتوان گفت این ترکیبات دارای اهمیت دارویی هستند.

**کلیدواژه:** شاهدانه، فیتوکانابینوئید، سرطان پروستات ، داکینگ ملکولی، مطالعات درون رایانه‌ای.

#### **Abstract**

In this thesis, the therapeutic effects of phytocannabinoids on prostate cancer. For this study, screening methods in silico and computations within the computer are used. For this purpose, the crystallographic structure of the target proteins and the structure of the therapeutic compounds are first downloaded and then, using the relevant software, a molecular docking operation is performed. The relevant results are analyzed in terms of the rate of ligand-protein binding tendency and the compounds that are more optimistic are selected and presented. In this study, Delta-9-Cis-tetrahydro cannabinol (Cis-THC) and Cannabinol (CBN) compounds had the best affinity and binding tendency that were common in most proteins. So these compounds can be said to have a medicinal importance.

**Keywords:** Cannabis, Phytocannabinoid, Prostate Cancer, Molecular Docking, in silico Studies