

# Cholinesterase Inhibition Activity and Docking Simulation Study of Coumarin Mannich Base Derivatives

A. Kiani<sup>1</sup>, L. Jalili-baleh<sup>2</sup>, Z. Abdolahi<sup>3</sup>, H. Nadri<sup>3</sup>, A. Foroumadi<sup>2,4</sup>, S. E. S. Ebrahimi<sup>1,4\*</sup>,  
M. Khoobi<sup>2,5\*\*</sup>

<sup>1</sup>Department of Medical Chemistry, School of Pharmacy, International Campus, Tehran University of Medical Science (IC-TUMS), Tehran, Iran

<sup>2</sup>Biomaterials Group, The Institute of Pharmaceutical Sciences (TIPS), Tehran University of Medical Sciences, Tehran 1417614411, Iran

<sup>3</sup>Department of Medicinal Chemistry, Faculty of pharmacy and Pharmaceutical Sciences Research Center, Shahid Sadoughi University of Medical Sciences, Yazd, Iran

<sup>4</sup>Department of Medicinal Chemistry, Faculty of Pharmacy, Tehran University of Medical Sciences, Tehran, Iran.

<sup>5</sup>Department of Pharmaceutical Biomaterials, Faculty of Pharmacy, Tehran University of Medical Sciences, Tehran, Iran

\*\* Email address: mehdi.khoobi@gmail.com

\* Email address: sesebrahimi@sina.tums.ac.ir

## مطالعه فعالیت مهارکنندگی کولین استراز و شبیه سازی به روش داکینگ مشتقات باز مانیخ کومارین

علی کیانی<sup>۱</sup>، لیلی جلیلی باله<sup>۲</sup>، زهرا عبدالهی<sup>۳</sup>، حمید ندری<sup>۳</sup>، علیرضا فرومدی<sup>۴</sup>، سید اسماعیل سادات  
ابراهیمی<sup>۴</sup>، مهدی خوبی<sup>۵</sup>\*\*

<sup>۱</sup>گروه شیمی دارویی، دانشکده داروسازی، پردیس بین الملل دانشگاه علوم پزشکی تهران، تهران، جمهوری اسلامی ایران

<sup>۲</sup>پژوهشکده علوم دارویی، دانشکده داروسازی، دانشگاه علوم پزشکی تهران، تهران، جمهوری اسلامی ایران

<sup>۳</sup>گروه شیمی دارویی، دانشکده داروسازی، دانشگاه علوم پزشکی شهید صدوقی، یزد، جمهوری اسلامی ایران

<sup>۴</sup>گروه شیمی دارویی، دانشکده داروسازی، دانشگاه علوم پزشکی تهران، تهران، جمهوری اسلامی ایران

<sup>۵</sup>گروه زیست مواد دارویی، دانشکده داروسازی، دانشگاه علوم پزشکی تهران، تهران، جمهوری اسلامی ایران

### چکیده

مهار استیل کولین استراز (AChE) و بوتیریل کولین استراز (BuChE) به عنوان دو شکل عمده کولین استراز (ChEs) رویکردی مشترک در درمان بیماری آلزایمر (AD) محسوب می شود. مطالعه حاضر با هدف بررسی ویژگی مهار کولین استراز مشتقات جدیدی بر پایه باز مانیخ کومارین انجام شد. یک سری از مشتقات مانیخ کومارین (4a-h) از طریق واکنش یک مرحله ای سه جزیی در شرایط محیطی سازگار با محیط زیست سنتز و بر اساس آزمون المن در برابر AChE و BuChE بررسی شد. شبیه سازی اتصال لیگاند-پروتئین نیز برای ترکیب قوی تر 4a انجام شد. علاوه بر این، معیارهای تشخیص دارو در ترکیبات هدف با استفاده از سرویس وب SwissADME پیش بینی شده است. تمام ترکیبات فعالیت مهاری ضعیف تا متوسط در برابر هر دو آنزیم AChE و BuChE داشتند. ترکیب 4a که حاوی گروه پارا-تولیل پیرازین بود، بهترین فعالیت را نسبت به AChE نشان داد (۴۲/۴٪ در ۳۲ میکرومولار)، در حالی که ترکیب 4g حاوی فینیل پیرازین یکی از بهترین مهار کننده های BuChE (۴۳/۹٪ در ۳۲ میکرومولار) بود. شبیه سازی docking پروتئین-لیگاند همچنین نشان داد که آمین بخش مهمی از ساختار ترکیب 4a در فعالیت مهار کنندگی ChE است. علاوه بر این، پیش بینی "پنج قاعده لیپینسکی" نشان داد که بیشتر ترکیبات هدف می توانند از BBB عبور کنند و خواصی داشته باشند که باعث می شود آنها به احتمال زیاد ترکیبات خوراکی برای انسان باشند. این مطالعه نشان می دهد که با برخی تغییرات ساختاری در سنتز باز مانیخ کومارین ممکن است بتوان آن را عنوان یک ترکیب بالقوه برای هدف قرار دادن AChE و BuChE در نظر گرفت.

واژه های کلیدی: بیماری آلزایمر؛ استیل کولین استراز؛ بوتیریل کولین استراز؛ ۴-هیدروکسی کومارین؛ باز مانیخ

# Effect of Calcination Rate on the Performance of Co-precipitated Cu-MgO Catalyst in Hydrogenation of Furfural

M. Ghashghaee<sup>1,2\*</sup>, S. Shirvani<sup>1,2</sup>, S. Sadjadi<sup>2,3</sup>, V. Farzaneh<sup>1,2</sup>

<sup>1</sup> Faculty of Petrochemicals, Iran Polymer and Petrochemical Institute, P.O. Box 14975-112, Tehran, Islamic Republic of Iran

<sup>2</sup> Biomass Conversion Science and Technology (BCST) Division, Iran Polymer and Petrochemical Institute, P.O. Box 14975-115, Tehran, Islamic Republic of Iran

<sup>3</sup> Gas Conversion Department, Faculty of Petrochemicals, Iran Polymer and Petrochemical Institute, P.O. Box 14975-112, Tehran, Islamic Republic of Iran

\*Email: m.ghashghaee@ippi.ac.ir, ghashghaee.m@gmail.com

## اثر سرعت کلسیناسیون بر راندمان کاتالیست Cu-MgO تهیه شده به روش هم‌رسوبی در هیدروژناسیون فورفورال

محمد قشقائی<sup>۱\*</sup>، سمیرا شیروانی<sup>۱،۲</sup>، سماحه السادات سجادی<sup>۲،۳</sup>، وحید فرزانه<sup>۱،۲</sup>

<sup>۱</sup> پژوهشکده پتروشیمی، پژوهشگاه پلیمر و پتروشیمی ایران، صندوق پستی ۱۱۲-۱۴۹۷۵، تهران، جمهوری اسلامی ایران  
<sup>۲</sup> هسته پژوهشی علوم و فناوری تبدیل زیست‌توده، پژوهشگاه پلیمر و پتروشیمی ایران، صندوق پستی ۱۱۵-۱۴۹۷۵، تهران، جمهوری اسلامی ایران  
<sup>۳</sup> گروه تبدیل گاز، پژوهشکده پتروشیمی، پژوهشگاه پلیمر و پتروشیمی ایران، صندوق پستی ۱۱۲-۱۴۹۷۵، تهران، جمهوری اسلامی ایران

### چکیده

کاتالیست‌های هم‌رسوبی Cu-MgO تهیه شده و در هیدروژناسیون فورفورال در فاز گاز مورد استفاده قرار گرفتند. اثر نرخ حرارت‌دهی در مرحله کلسیناسیون با مقایسه راندمان سه کاتالیست که با دستورالعمل یکسان تهیه و با سرعت‌های حرارت‌دهی متفاوت کلسینه شده بودند مورد مطالعه قرار گرفت. نتایج نشان داد که تغییر نرخ حرارت‌دهی قادر است خواص ساختاری کاتالیست‌ها و نتیجتاً راندمان کاتالیستی آنها را از نظر فعالیت، کزینش‌پذیری و پایداری فعالیت کاتالیست دستخوش تغییر قرار دهد. فعالیت کاتالیستی و انتخاب‌پذیری بسیار ضعیف (کمتر از ۰/۱ درصد میزان تبدیل فورفورال و ۴۰ درصد میزان انتخاب‌پذیری نسبت به فورفوریل‌الکل پس از ۲۴۰ دقیقه از شروع فرایند) متعلق به کاتالیست با کمترین میزان ریت کلسیناسیون بود، در حالی که دو کاتالیست دیگر که با سرعت‌های ۵ و ۱۰ کلوین بر دقیقه کلسینه شدند، در طول فرایند بیش از ۸۸ درصد میزان تبدیل فورفورال و ۸۵ درصد انتخاب‌پذیری نسبت به فورفوریل‌الکل از خود نشان دادند.

واژه‌های کلیدی: هیدروژناسیون؛ فورفورال؛ فورفوریل‌الکل؛ مس؛ کلسیناسیون

# A Crystallization-Induced Asymmetric Transformation Using Racemic Phenyl Alanine Methyl Ester Derivatives as Versatile Precursors to Prepare Amino Acids

S. Rahmani-Nezhad<sup>1</sup>, Sh. Dianat<sup>1</sup>, A. Hadjiakhoondi<sup>\*1,2</sup>

<sup>1</sup>Medicinal Plants Research Center, Faculty of Pharmacy, Tehran University of Medical Sciences, Tehran, Islamic Republic of Iran

<sup>2</sup>Department of Pharmacognosy, Faculty of Pharmacy, Tehran University of Medical Sciences, Tehran, Islamic Republic of Iran

\*E-mail: drabbhadji@gmail.com

## "تبدیل نامتقارن با استفاده از کریستالیزاسیون مشتقات راسمیک فنیل آلانین متیل استر به عنوان پیش سازهای چند منظوره برای آماده سازی آمینو اسیدها"

سمیرا رحمانی نژاد<sup>۱</sup>، شیما دیانت<sup>۱</sup> و عباس حاجی آخوندی<sup>\*۱،۲</sup>

<sup>۱</sup> مرکز تحقیقات گیاهان دارویی، دانشکده داروسازی، دانشگاه علوم پزشکی، تهران، جمهوری اسلامی ایران

<sup>۲</sup> گروه فارماکونوزی، دانشکده داروسازی، دانشگاه علوم پزشکی، تهران، جمهوری اسلامی ایران

### چکیده

ال دوپا و ال تیروزین به عنوان پیش سازهای سنتز بیولوژیکی انتقال دهنده های عصبی آمین محسوب می شوند. از طرف دیگر، فنیل آلانین به عنوان یک آمینو اسید آروماتیک (AAA)، پیش ساز در سنتز ال دوپا و ال تیروزین است. یکی از روش های مناسب برای جداسازی آمینو اسیدها، می تواند از طریق تشکیل دیاسترنومرها اعمال گردد. از میان روش های مختلفی که در این مورد وجود دارد، تبدیل نامتقارن ناشی از کریستالیزاسیون (CIAT) که به صورت راسمیک شدن در ظرف و کریستالیزاسیون انتخابی یک محصول واکنش است، می تواند انتخاب مناسبی باشد. با استفاده از این روش، تهیه ال تیروزین و ال دوپا گزارش می شود. در این مسیر سنتزی، مشتقات راسمیک فنیل آلانین متیل استر، به عنوان پیش سازهای چند منظوره، از طریق کاهش مشتقات آزلاکتون به وسیله منیزیم در متانول به عنوان یک عامل کاهنده تهیه شدند و سپس در مرحله جداسازی، انانتیومر S از ۳،۴-دی هیدروکسی فنیل آلانین و ۴-هیدروکسی فنیل آلانین از طریق تشکیل نمک با (2R,3R)- تارتاریک اسید در حضور مقادیر کاتالیستی از ۵-نیترو سالیسیل الدهید با بازده خوب و خلوص نوری بالا بدست آمدند.

واژه های کلیدی: آزلاکتون، فنیل آلانین متیل استر راسمیک؛ آمینو اسیدها؛ جداسازی نامتقارن

# Silica Boron Sulfonic Acid as Heterogeneous and Highly Efficient Solid Acid Catalyst For the Preparation of Hantzsch 1,4-dihydropyridines Under Solvent-Free

S. Sajjadifar\*, and P. Masoudi

Department of Chemistry, Payame Noor University, PO BOX19395-469 Tehran, Islamic Republic of Iran

\*Email: sami.sajjadifar@gmail.com

## سلیکا بورون سولفونیک اسید به عنوان کاتالیزور جامد ناهمگن و بسیار کارآمد برای تهیه هانش ۱،۴-دی هیدروپیریدینها تحت شرایط بدون حلال

سامی سجادی فر\* و پگاه مسعودی

گروه شیمی، دانشگاه پیام نور، کدپستی ۴۶۹۷-۱۹۳۹۵، تهران، ایران

### چکیده

سلیکا بوران سولفونیک اسید به عنوان یک کاتالیزگر ناهمگن، ارزان، قابل بازیافت و با کارایی بالا با موفقیت سنتز و استفاده شد برای سنتز تک ظرف سه جزئی از بیولوژیک فعال هانش ۱ و ۴-دی هیدروپیریدین از طریق تراکم از آلدهیدهای آروماتیک، ترکیب ۱ و ۳-دی کربونیل و آمونیوم استات تحت شرایط بدون حلال در شرایط رفلکس. سلیکا بوران سولفونیک اسید، اسیدی با خلصت دوگانه است (بوسیله اتم بور خلصت اسید لوویسی و از طرف گروههای  $\text{OSO}_3\text{H}$  به عنوان اسید برونستی)، که می تواند در واکنش ها اثر بهتری را ایجاد نماید. واکنش در شرایط ملایم و بدون حلال انجام شد، همچنین سلیکا بوران سولفونیک اسید برای پنج بار متوالی، بازیافت و دوباره استفاده شد.

واژه‌های کلیدی: اسیدی لوویس و برونستد؛ واکنش هانش؛ ۱ و ۴-دی هیدروپیریدین؛ بدون حلال؛ تراکم تک ظرفی

# Fault Strike Detection Using Satellite Gravity Data Decomposition by Discrete Wavelets: A Case Study from Iran

A. Eshaghzadeh<sup>\*1</sup>, A. Dehghanpour<sup>2</sup>, R. Alsadat Kalantari<sup>1</sup>

<sup>1</sup> Institute of Geophysics, University of Tehran, Islamic Republic of Iran

<sup>2</sup> Islamic Azad University, Science and Research Branch, Tehran, Islamic Republic of Iran

\*E-mail: eshaghzadeh.ata@gmail.com

## شناسایی امتداد گسل با استفاده از تجزیه داده گرانی ماهواره‌ای بوسیله موجک‌های گسسته: مطالعه موردی از ایران

عطا اسحق زاده<sup>\*1</sup>، علیرضا دهقانپور<sup>2</sup>، رقیه السادات کلانتری<sup>1</sup>

<sup>1</sup> موسسه ژئوفیزیک دانشگاه تهران، تهران، جمهوری اسلامی ایران

<sup>2</sup> دانشگاه آزاد اسلامی، واحد علوم و تحقیقات، تهران، جمهوری اسلامی ایران

### چکیده

تعیین مرز چشمه‌های بی‌هنجاری گرانی می‌تواند تفسیر میدان گرانی را آسان نماید. در این مقاله، تبدیل موجک گسسته دو بعدی به‌عنوان یک روش تعیین مرز چشمه بی‌هنجاری گرانی مورد استفاده قرار گرفت و داده گرانی ماهواره GRACE با استفاده از تبدیل موجک گسسته تجزیه شد. تبدیل موجک گسسته موجب تجزیه ضرایب تقریب به چهار مولفه مجزا می‌شود: تقریب، مولفه افقی، مولفه عمودی و مولفه قطری. برای ارزیابی کارایی موجک‌ها، داده‌های گرانی مصنوعی، با و بدون نوفه، با استفاده از شش موجک گسسته دو بعدی یک نوبت تجزیه شدند. داده گرانی ماهواره‌ای مربوط به یک بخش از منطقه مکران (جنوب شرقی ایران) بوسیله تبدیل موجک گسسته به منظور آشکار سازی امتداد گسل سراوان مورد تجزیه و تحلیل قرار گرفت. نتایج، عملکرد قابل قبول موجک‌های مادر هار و بیوارتوگونال را در برجسته کردن لبه‌های چشمه بی‌هنجاری گرانی مصنوعی و واقعی را نشان داد. همچنین، این نتایج ثابت می‌کنند که داده گرانی ماهواره‌ای می‌توانند برای مطالعه ساختارهای زمین‌شناسی منطقه‌ای، بویژه در آشکار کردن گسل‌های پنهان که اهمیت زیادی در تحلیل خطر زلزله دارند مناسب باشند.

واژه‌های کلیدی: تبدیل موجک گسسته؛ گرانی ماهواره‌ای؛ گسل سراوان؛ مکران

# Barremian-Early Aptian Ammonites from the Tirgan Formation, Kopet-Dagh Sedimentary Basin, NE Iran

M. Molaei<sup>1</sup>, S. H. Vaziri<sup>\*1</sup>, S. N. Raisossadat<sup>2</sup>, M. Taherpour-Khalil-Abad<sup>3</sup>, J. Taheri<sup>4</sup>

<sup>1</sup> Department of Geology, North Tehran Branch, Islamic Azad University, Tehran, Islamic Republic of Iran

<sup>2</sup> Department of Geology, Faculty of Sciences, University of Birjand, Birjand, Islamic Republic of Iran

<sup>3</sup> Young Researchers and Elite Club, Mashhad Branch, Islamic Azad University, Mashhad, Islamic Republic of Iran

<sup>4</sup> Geological Survey of Iran, NE Territory, Mashhad, Islamic Republic of Iran

\*Email: h\_vaziri@iau-tnb.ac.ir

## آمونیت‌های بارمین پسین – آپتین پیشین سازند تیرگان، حوضه رسوبی کپه داغ،

### شمال شرق ایران

معصومه مولایی<sup>۱</sup>، سید حمید وزیری<sup>\*۱</sup>، سید ناصر رئیس السادات<sup>۲</sup>، مرتضی طاهرپور خلیل آباد<sup>۳</sup>،

جعفر طاهری<sup>۴</sup>

<sup>۱</sup>گروه زمین شناسی، واحد تهران شمال، دانشگاه آزاد اسلامی، تهران، جمهوری اسلامی ایران

<sup>۲</sup>گروه زمین شناسی، دانشکده علوم، دانشگاه بیرجند، بیرجند، جمهوری اسلامی ایران

<sup>۳</sup>باشگاه پژوهشگران جوان و نخبگان، واحد مشهد، دانشگاه آزاد اسلامی، مشهد، جمهوری اسلامی ایران

<sup>۴</sup>اداره کل زمین شناسی و اکتشافات معدنی کشور، منطقه شمال شرق، مشهد، جمهوری اسلامی ایران

### چکیده

در طی مطالعات صحرایی صورت پذیرفته بر روی سازند تیرگان در غرب حوضه رسوبی کپه داغ، نمونه‌های زیبایی از تجمعات آمونیتی از توالی‌های کربناته این سازند به دست آمد. این موضوع نه تنها از دیدگاه تعیین سن بلکه از لحاظ چینه‌شناسی نیز حائز اهمیت است. در این پژوهش، تعداد سه جنس *Chelonicer* *Deshayesites* *Heteroceras* و نیز یک جنس احتمالی از *Turkmeniceras* شناسایی گردید. آمونیت‌های شناسایی شده سن بارمین پسین-آپتین پیشین را برای بخش‌های میانی و بالایی سازند تیرگان در برش چینه‌شناسی شهرآباد پیشنهاد می‌کنند.

واژه‌های کلیدی: آمونیت؛ کرتاسه زیرین؛ بارمین پسین؛ آپتین پیشین؛ سازند تیرگان

# Sediment-Hosted Copper Mineralization in Bavanat Region, Southern Sanandaj-Sirjan, Iran

K. Noori Khankahdani\*, M. Karimi

Department of Geology, Shiraz Branch, Islamic Azad University, Shiraz, Islamic republic of Iran  
\* Email: noorikamal@yahoo.com

## کانه زایی مس با سنگ میزبان رسوبی در منطقه بوانات سنندج – سیرجان جنوبی، ایران

کمال نوری خانکهدانی\*، مهرداد کریمی

<sup>1</sup> گروه زمین شناسی، واحد شیراز، دانشگاه آزاد اسلامی، شیراز، جمهوری اسلامی ایران

### چکیده

کانه زایی مس به شکل رسوبی در دو منطقه منج و جولانی در بوانات (کمر بند دگرگونی سنندج – سیرجان جنوبی) مشاهده شده است. سنگ میزبان کانه زایی مس در این منطقه، ماسه سنگ‌های سبز رنگی بوده‌اند که براساس مطالعات جاری، عموماً در گروه ساب آرکوز و آرکوز قرار دارند. سن این ماسه سنگ‌ها، ژوراسیک میانی می‌باشد. کانه زایی مس به دو صورت دیده می‌شود، سولفیدی شامل کالکوپیریت، کالکوسیت، کولیت و نیز غیرسولفیدی شامل مالاکیت، آزوریت و کریزوکولا. کانسار رسوبی مس بوانات به دلایل متعددی از جمله سنگ میزبان (ماسه سنگ سبز)، سنگ‌های همراه (همراهی همیشگی با سیلستون‌های ارغوانی)، سن تشکیل، محیط زمین شناسی و کانه زایی‌های مشاهده شده به کانسارهای رسوبی نوع سرخ لایه هم چون **Nacimiento** در آمریکا بسیار شباهت دارد. از این شباهت‌ها می‌توان در حین مطالعات تکمیلی بهره برداری نمود. کانسارهای مس رسوبی مطالعه شده از نظر ویژگی‌های متفاوت مانند سنگ میزبان، زمان تشکیل، سنگ‌های بالایی و پایینی و نیز نوع کانه زایی مس، با کانسار مس جیان متفاوت هستند. بر اساس نتایج تجزیه شیمیایی، میزان متوسط مس در نمونه‌های تجزیه شده برابر **15509 ppm** بوده است که نشان می‌دهد انجام مطالعات تکمیلی ضروری است.

واژه‌های کلیدی: بوانات؛ کانه زایی مس رسوبی؛ سرخ لایه

# Genetic-Fuzzy Data Envelopment Analysis Model for Evaluating Financial Institutions Relative Productivity in a Fluctuating Economic Market

V. I. Osubor\*, F. A. Imouokhome and J. Okoh

*Department of Computer Science, Faculty of Physical Sciences, University of Benin, Benin, Nigeria*

*\* Email: viosubor@uniben.edu*

## مدل تحلیل پوششی داده‌های ژنتیکی فازی برای ارزیابی بهره‌وری نسبی سازه‌های مالی در یک بازار اقتصادی نوظهور

ورونیکا اسوبر\*، فرانسیس ایموخم و جو اکو

گروه کامپیوتر، دانشکده علوم فیزیکی، دانشگاه بنین، بنین، نیجریه

### چکیده

در این مقاله مدل الگوریتم ژنتیک تحلیل پوششی داده‌های فازی (GA-FDEA) ارائه شده است که برای انتخاب بهینه شاخص‌های اقتصادی برای اندازه‌گیری بهره‌وری نسبی و عملکرد مؤسسات مالی مناسب است. اطلاعات ناقص و یا نامشخص مؤسسات مالی با توجه به سیاست‌های متفاوت پولی و ریسک بازار از کمیسیون بورس اوراق بهادار نیجریه بازبینی شده و ارزیابی شده است. مشاهده شد که GA-FDEA نتایجی بهتر از DEA معمولی ارائه می‌دهد. یافته‌ها نشان می‌دهد که بارومترهای اقتصادی برای اطمینان از پایداری این مؤسسات در جهت افزایش رشد انتظارات این نهادها و کشور به طور کلی است.

واژه‌های کلیدی: تجزیه و تحلیل پوشش؛ تجزیه و تحلیل داده‌ها؛ مالی، الگوریتم ژنتیک