



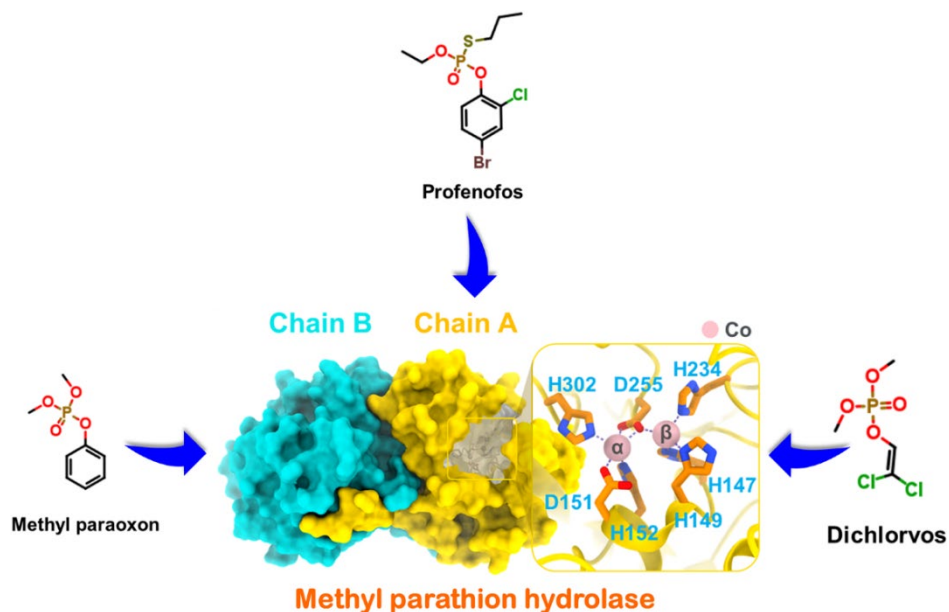
Department of Pharmacology, Faculty of Science  
Mahidol University

Molecular binding of different classes of organophosphates to methyl parathion hydrolase from *Ochrobactrum* species

The study focuses on methyl parathion hydrolase (MPH), an enzyme with the potential to serve as an enzymatic bioremediator for organophosphates (OPs). The research aims to comprehend the binding of various OP pesticides to MPH with cobalt(II) metal ions. Using molecular modeling approaches, the study explores the interactions between MPH and pesticides, including methyl paraoxon, dichlorvos, and profenofos. The results indicate that the coordination of beta metal ions is perturbed to accommodate pesticides, and profenofos exhibits a stronger binding affinity to MPH compared to other substrates. Therefore, these findings provide molecular insights into OP pesticide binding to MPH, potentially aiding in the design of MPH for the efficient degradation of OP pesticides.

การยึดจับเชิงโมเลกุลของสารประกอบออร์กาโนฟอสเฟตที่แตกต่างกันต่อเมทิลพาราไรออนไฮโดรเลสจาก *Ochrobactrum* species

การศึกษานี้มุ่งศึกษาเอนไซม์เมทิลพาราไรออนไฮโดรเลส (MPH) ซึ่งเอนไซม์ที่มีศักยภาพในการทำหน้าที่กำจัดสารประกอบออร์กาโนฟอสเฟต (OPs) งานวิจัยมีเป้าหมายที่จะเข้าใจกระบวนการจับกันของสารประกอบ OP ต่าง ๆ กับ MPH โดยมีโลหะโคบอลต์ (II) เป็นตัวช่วยโดยใช้วิธีการจำลองโมเลกุล การศึกษานี้ได้ตรวจสอบอันตรกิริยาที่เกิดขึ้นระหว่าง MPH และสารประกอบยาฆ่าแมลง ได้แก่ เมทิลพาราไรออน ออกซอน ไดคลอรวอส และโปรฟีโนฟอส ผลการวิจัยแสดงให้เห็นว่า โคออร์ดิเนชันของโลหะเบต้าไอออนถูกรบกวนเพื่อให้มีพื้นที่ในการจับกับสารประกอบยาฆ่าแมลง และโปรฟีโนฟอสมีความสามารถในการจับกับ MPH ได้แข็งแรงกว่าสารประกอบอื่น ๆ ดังนั้น ผลการวิจัยนี้ได้ให้ข้อมูลเชิงลึกทางโมเลกุลเกี่ยวกับการจับกันของสารประกอบออร์กาโนฟอสเฟตกับ MPH ซึ่งอาจเป็นประโยชน์ในการออกแบบ MPH ตัวใหม่ ๆ เพื่อให้มีประสิทธิภาพในกระบวนการย่อยสลายสารประกอบ OP ได้ดียิ่งขึ้นต่อไป



**Reference:**

Bhat N, **Nutho B**, Hanpaibool C, Hadsadee S, Vangnai A, Rungrotmongkol T. Molecular binding of different classes of organophosphates to methyl parathion hydrolase from *Ochrobactrum* species. *Proteins*. 2024; 92(1): 96-105.

DOI: <https://doi.org/10.1002/prot.26579>



ความเชื่อมโยงกับเป้าหมาย SDGs:

เป้าหมายที่ 3: การมีสุขภาพและความเป็นอยู่ที่ดี