

أدت التجزئة الموجهة حيويًا والتحقيق الكيميائي لسبقان كولفيليا راسيموسا إلى تحديد نوعين جديدين من الفا- وبيتا ثنائي هيدروكسي الشالكونات هما كولفيول أ (1) وكولفيول ب (2) مع خمسة عشر مركب معروف. تم التعرف على المركبات عن طريق تفسير البيانات الطيفية. تم تعيين الاتجاه في الفراغ للمركبين 1 و 2 عن طريق مزيج من التعديل الكيميائي وبيانات الشعاع الدائري الإلكتروني. تم تقييم المركبات المفصلة لنشاط تثبيطهم تجاه الانزيمات البشرية المؤكسدة لأحادي الأمين أ وب. أظهر المركب 1 تثبيط تفضيلي ضد الانزيم أ IC_{50} 0.62، بينما س-نارينجين (13) و ايزوليكويرتيجينين (15) تثبيط تفضيلي للانزيم ب 0.27 و 0.51 ميكرومتر IC_{50} ، SIA / B 31.77 و 44.69 ، على التوالي. أظهر فيسيتين (11) تثبيط ضد الانزيم أ بقيمة IC_{50} من 4.62 ميكرومتر ولم يظهر أي نشاط مثبط نحو- الانزيم ب حتى تركيز يصل إلى 100 ميكرومتر. وأجريت دراسات المحاكاة الجزيئية للمركبات الأكثر نشاطًا لإثبات أوضاع الارتباط المقترض مع الانزيمات. أظهرت أن المركب 1 ارتبط مع الأحماض الأمينية Gln215 و Ala111 و Phe352 و Phe208 والتي لها دور في اتجاه وتثبيت المثبط للانزيم أ ، بينما تحتل S-naringenin (13) تجاوبف الدخول وتتفاعل مع Tyr326 ، والذي يعتبر حمض امينى هام جدا في التعرف على المثبط للانزيم ب.