

## عنوان مقاله:

مدلسازی به روش هومولوژی و شبیه سازی دینامیک مولکولی پروتئین Rab23 انسانی به هدف انجام مطالعات Docking با لیگاند کلاسترول

## محل انتشار:

فصلنامه زیست شناسی کاربردی، دوره 26، شماره 1 (سال: 1392)

تعداد صفحات اصل مقاله: 13

## نویسندگان:

شیوا کلاتتری - دانشگاه شهید بهشتی

محمد تقی زاده - دانشگاه بیوشیمی و بیوفیزیک تهران

معصومه دهقانی - دانشگاه بیوشیمی و بیوفیزیک تهران

آرمین مددکار سبحانی - دانشگاه بیوشیمی و بیوفیزیک تهران

## خلاصه مقاله:

Rab23 یکی از پروتئینهای خانواده Rab می باشد که مسوول تنظیم ادغام و اتصال غشاء ویزیکولها با اندامکهای سلولهای یوکاریوتی می باشد. این پروتئین یک تنظیم کننده منفی خودکار (Signaling) hedgehog در مهره داران است. مسیر علامت hedgehog در رشد اکثر ارگانها و بافتهای مهره داران نقش محوری داشته و ارتباط آن با نقایص مادرزادی و بسیاری از انواع تومورها مشخص شده است. در این مسیر و ناهنجاریهای بیانی آن در بسیاری از انواع بیماریها دیده می شود. از جمله بیماریهایی که ناشی از جهش در ژن این پروتئین و یا به طور کلی بیان غیر نرمال آن می باشد عبارتند از: سندرمهای Carpenter و Gorlin، کارسینوما تیروئید، هپاتوسل کارسینوما، تومورزایی و انواع مختلف سرطان. در این مطالعه مدلسازی این پروتئین با استفاده از نرم افزار Modeller9v7 پس از انتخاب الگوی مناسب با میزان شباهت بالا از داده پ ا ی ا بهترین مدل ساخته شده از طریق آنالیزهای نرم افزار Procheck رسید. مرحله شبیه سازی انتخاب شد. شبیه سازی دینامیک مولکولی آن با استفاده از نرم افزار GROMACS انجام رسید و سپس نواحی اتصال آن با کلاسترول با استفاده از نرم افزار Autodock4.2 به دست آمد. پایداری و انرژی نشان می دهند که مدل ساختار سه بعدی به دست آمده کاملا پایدار بوده لذا به واقعیت نزدیک است. م ط ا ل ع ا نشان می دهد که این پروتئین جایگاه اتصالی برای کلاسترول دارد. نتیجه گیری: داشتن جایگاه اتصال برای کلاسترول بدان معنی است که

این پروتئین علاوه بر انجام عملکرد خود با همکاری دیگر پروتئین‌ها  
م  
با ورود به داخل غشا در ناحیه‌ای که دارای کلاسترول است بخش دیگری از عملکرد خود را در اتصال غشا و زیگول انجام می‌دهد. با توجه  
به  
به اهمیت  
ک Rab23 و ل و ژ و ی  
، شبیه سازی آن در محیط silico  
می‌تواند در جهت اهداف درمانی برای طراحی دارو و یا لیگاندهای مهارتی مفید  
باشد.

### کلمات کلیدی:

مولکولی بنیان (هولوژی)، شبیه‌سازی دینامیک مدل‌سازی به روش همسان، rab23

### لینک ثابت مقاله در پایگاه سیویلیکا:

<https://civilica.com/doc/1023071>

