سیویلیکا - ناشر تخصصی مقالات کنفرانس ها و ژورنال ها
گواهی ثبت مقاله در سیویلیکا
CIVILICA.com

عنوان مقاله:

شبیه سازی برهمکنش مهارکننده dGTP, dGDP, dGMP, dIMP, Ditp با آنزیم داکسی گوانوزین کیناز

محل انتشار:

سومین همایش ملی تحقیقات نوین در شیمی و مهندسی شیمی (سال: 1390)

تعداد صفحات اصل مقاله: 5

نویسندگان:

سهیلا غلامیان - *دانشجوی گروه شیمی فیزیک دانشگاه آزاد اسلامی واحد علوم و تحقیقات خوزستان*

محمدرضا دایر - *استادیار گروه زیست شناسی دانشگاه شهید چمران اهواز*

خلاصه مقاله:

دراین تحقیق برهمکنش آنزیم داکسی گوانزین کیناز Dgk با مهارکننده های نوکلئوتیدی آن dGTP, dGDP dIMP, dITP, dGMP بوسیله شبیه سازی دینامیک مولکولی در طول مدت دو نانوثانیه مطالعه گردید. دراین مطالعه نسخه 3.3.2 نرم افزار گرومکس قابل نصب در سیستم عامل لینوکس برای انجام محاسبات دینامیک مولکولی استفاده گردید هدف ازاین تحقیق مطالعه مکانیسم عمل مهارکننده های آنزیم داکسی گوانوزین کیناز و بررسی عوامل ساختمانی در این فرایند مهاری می باشد از آنجایی که آنزیم داکسی گوانزین کیناز اولین آنزیم موثر در مسیر بازیافتی تولید نوکلئوتیدهای پورینی در موجودات زنده است و مهار آن می تواند نتایج بیولوژیکی مهمی بدنبال داشته باشد. نتایج بدست آمده ازاین تحقیق نشان میدهد که بیشترین برهمکنش با داکسی گوانوزین کیناز و قدرت مهاری بیشتر متعلق به مهار کننده ای است که دارای بیشترین انحراف معیار جذر میانگین مربعات اسکلت پروتئین RMSD نسبت به ساختار اولیه در طول شبیه سازی و همچنین دارای بیشترین وزن مولکولی و بیشترین اندیکس انتگرال می باشد و بیشترین تاثیر را برساختار آنزیم اعمال می کند براساس یافته های حاصل دریافتیم که مهارکننده dGTP بعنوان قویترین مهارکننده آنزیم دربایندینگ سایتی ویژه واقع در انتهای کربوکسیل آنزیم آنهم از طریق برقراری برهمکنشهای الکتروستاتیک اتصال می یابد.

کلمات کلیدی:

داکسی گوانوزین کیناز Dgk، دینامیک مولکولی، شبیه سازی، گرومکس، مهارکننده

لینک ثابت مقاله در پایگاه سیویلیکا:

https://civilica.com/doc/130388