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

عنوان مقاله:

شبیه سازی و مقایسه ساختار سوم پروتئین اسپایک ،SARS-CoV-۲ ، Bat-SL-CoVZC۲۱
PCoV_GX-P۴L و شناسایی اسیدهای آمینه هات اسپات در ایجاد ساختار تریمر پروتئین

محل انتشار:

مجله تازه های بیوتکنولوژی سلولی – مولکولی, دوره 12, شماره 48 (سال: 1401)

تعداد صفحات اصل مقاله: 14

نویسنده:

آزاده لهراسبی نژاد - *Department of Agricultural Biotechnology, Shahid Bahonar University of Kerman, Kerman, Iran*

خلاصه مقاله:

سابقه و هدف: بیماری کووید-۱۹ با علائم حاد تنفسی در سال ۲۰۱۹ ظاهر شد. این بیماری با تب، سرفه و عوارض شدید تنفسی همراه بود. عامل بیماری متعلق به خانواده بتا کرونا ویروس بوده و تحت عنوان SARS-CoV-۲ نامگذاری شد. شیوع کووید-۱۹ و ایجاد حالت اپیدمیک جهانی موجب شد تلاشهای بسیاری برای شناخت ساختار و عملکرد این ویروس انجام شود. پروتئین اسپایک، یک پروتئین گلیکوزیله نسبتا سنگین است که از سه زیر واحد یکسان ساخته شده است و به صورت یک هومو تریمر در سطح ویروس ظاهر می شود. این پروتئین پس از اتصال به گیرنده سطح سلول میزبان (آنزیم مبدل آنژیوتانسین-۲) دچار تغییر ساختاری می شود و در نهایت موجب ورود ویروس درون سلول میزبان می شود. این روند برای ورود ویروس ها به درون سلول های انسانی و آلوده کردن آنها لازم است. بنابراین شناخت جزئیات ساختاری این پروتئین نقش مهمی در درک عملکرد آن بازی می کند. مواد و روش ها: ابتدا ساختار سوم پروتئین های اسپایک مربوط به SARS-CoV-۲ (کرونا ویروس انسانی)، bat-SL-CoVZC۲۱ (کرونا ویروس خفاش) و PCoV_GX-P۴L (کرونا ویروس پانگولین) از طریق همولوژی مدلینگ ساخته شد. این ساختارها پس از ارزیابی و اعتبار سنجی، به کمک نرم افزار NAMD شبیه سازی شدند. ویژگی ساختاری پروتئین های اسپایک از نظر شکل فضایی، اندازه گیری مساحت سطح رابط بین مونومرها، پارامترهای ترمودینامیکی، تعیین پایداری ساختارهای تریمر و شناسایی اسیدهای آمینه مهم در ایجاد اتصالات بین زیرواحدها ارزیابی شدند. یافته ها: ارزیابی زیر واحدهای سازنده پروتئین تریمر اسپایک نشان دادند پروتئین های اسپایک در SARS-CoV-۲دارای بیشترین مقدار ۱۱۳/۲ (kcal/mol ΔGdiss) است که بیانگر پایدار بودن ساختار پروتئین تریمر در بین سایر پروتئین های اسپایک می باشد. کمترین میزان ۱۰۰/۶ (kcal/mol ΔGdiss) برای پروتئین اسپایک PCoV_GX-P۴L بدست آمد. مساحت سطح رابط بین زیر واحدها در تمام پروتئین های اسپایک تقریبا یکسان بود. اسیدهای آمینه ,Y۳۶۹ D۴۰۵، Y۳۶۹ ،D۵۷۴,Y۷۰۷,Y۸۳۷,D۹۸۵ در زیر واحد A و Y۷۰۷ در زیر واحد B و Y۷۰۷ در زیر واحد C بعنوان اسیدهای آمینه هات اسپات قرمز برای پروتئین اسپایک SARS-CoV-۲ شناخته شدند. نتیجه گیری: بررسی ساختار پروتئین های سطح ویروس در مقیاس اتمی، و شناخت رزیدوهای هات اسپات که نقش مهمی در ایجاد اتصالات بین مونومری بازی می کنند، دریچه ای به سمت شناخت و عملکرد بیشتر ویروس ایجاد کرده است و به این ترتیب می تواند اطلاعات جدیدی برای خنثی سازی این ویروس فراهم می کند.

کلمات کلیدی:

,SARS-CoV-۲, spike protein, three-dimensional structure, simulation, hotspot residues, lau Science
سارس-کووید-۲, پروتئین اسپایک, ساختار سه بعدی, شبیه سازی, اسید های آمینه هات اسپات

لینک ثابت مقاله در پایگاه سیویلیکا:

https://civilica.com/doc/1581653