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

عنوان مقاله:
محاسبه تغییرات مربع میانگین جابجائی مهارکننده های داکسی گوانوزین کیناز ازطریق شبیه سازی دینامیک مولکولی

محل انتشار:
اولین همایش ملی علوم زیستی (سال: 1391)

تعداد صفحات اصل مقاله: 7

نویسنده:
سهیلا غلامیان - *دانشگاه آزاد اسلامی واحد علوم و تحقیقات خوزستان*

خلاصه مقاله:
دراین تحقیق برهمکنش آنزیم داکسی گوانوزین کینازdGK بامهارکننده های نوکلئوتیدی آن ,dGTP dGDPdGMP, dIMP, Ditp بوسیله شبیه سازی دینامیک مولکولی درطول مدت دونانوثانیه مطالعه گردید دراین مطالعه نسخه 3.3.2 نرم افزار گرومکس قابل نصب درسیستم 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 دراین فرایند مهاری میب اشد از انجایی که انزیم داکسی گوانوزین کیناز اولین آنزیم موثر درمسیر بازیافتی تولید نوکلئوتیدهای پورینی درموجودات زنده است و مهار آن میتواند نتایج بیولوژیکی مهمی بدنبال داشته باشد نتایج بدست آمده ازا ین تحقیق نشان میدهد که بیشترین برهمکنش با داکسی گوانوزین کیناز و قدرت مهاری بیشتر متعلق به مهارکننده ای استکه دارای بیشترین تغییرات مربع میانگین جابجایی مهارکننده یا msd درطول شبیه سازی می باشد و بیشترین تاثیر را برساختار آنزیم اعمال می کند.

کلمات کلیدی:
داکسیگوانوزین کینازdGK دینامیک مولکولی، شبیه سازی، گرومکس، مهارکننده

لینک ثابت مقاله در پایگاه سیویلیکا:
https://civilica.com/doc/183066