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

عنوان مقاله:
بررسی برهمکنش داروی فنلزین با پروتئین مونو آمین اکسیداز با استفاده از شبیه سازی دینامیک مولکولی

محل انتشار:
اولین کنفرانس ملی تازه های پژوهش در صنایع شیمی، نفت، گاز، پالایش و پتروشیمی (سال: 1402)

تعداد صفحات اصل مقاله: 11

نویسندگان:
منصوره السادات مهرتاج الدینی - *دانشجوی کارشناسی ارشد ،گروه شیمی دانشکده علوم پایه دانشگاه شهید باهنر کرمان، کرمان، ایران*

مریم دهستانی - *استاد، گروه شیمی دانشکده علوم پایه دانشگاه شهید باهنر کرمان، کرمان، ایران*

خلاصه مقاله:
افسردگی یکی از رایج ترین اختلالات سیستم عصبی است. دارو درمانی یکی از موثر ترین درمان اختلال عصبی است. مونوآمین اکسیداز یکی از آنزیم هایی می باشد که باعث افسردگی می شود. در کار تحقیقاتی حاضر، برهمکنش داروی فنلزین با آنزیم مونوآمین اکسیداز با استفاده از شبیه سازی دینامیک مولکولی در دمای ۳۱۰ K بررسی شده است. ابتدا، برای یافتن نوع برهم کنش و جایگاه اتصال ترکیب دارویی فنلزین به عنوان داروی مهارکننده آنزیم مونوآمین اکسیداز انسانی با ۵۲۰ اسیدآمینه، از روش داکینگ مولکولی استفاده شده است. محاسبات داکینگ مولکولی با استفاده از بسته نرم افزاری آتوداک ۲.۴ استفاده شده است. پس از انجام محاسبات داکینگ، شبیه سازی دینامیک مولکولی برروی پروتئین آنزیم مونوآمین اکسیداز با کد 2BYB در دمای ۳۱۰K در مدت زمان ۲۰۰ns با استفاده از نرم افزار گرومکس انجام شده است. طبق نتایج به دست آمده از شبیه سازی دینامیک مولکولی، میان آنزیم مونو آمین اکسیداز با داروی فنلزین کمپلکس پایداری در دمای ۳۱۰K به وجود می آید و این دارو فعالیت آنزیم مونوآمین اکسیداز را مهار می کند.

کلمات کلیدی:
افسردگی، مونوآمین اکسیداز، فنلزین، شبیه سازی دینامیک مولکولی، نرم افزار گرومکس

لینک ثابت مقاله در پایگاه سیویلیکا:
https://civilica.com/doc/1893783