

## عنوان مقاله:

طراحی بیوانفورماتیکی ترکیب ضد سرطانی با پتانسیل مهار توپوایزومراز ۱

## محل انتشار:

ششمین همایش بین المللی زیست شناسی و علوم زمین (سال: 1402)

تعداد صفحات اصل مقاله: 6

## نویسنده:

مهلا کریمی فر - دانشجوی زیست شناسی سلولی و مولکولی، گروه زیست شناسی، دانشکده علوم پایه، دانشگاه کوثر بجنورد، بجنورد، خراسان شمالی، ایران

## خلاصه مقاله:

مقدمه: توپوایزومرازها در سلول های سرطانی بیش از حد بیان می شوند و سرعت تقسیم سلول را تسریع میکنند. بنابراین مهار عملکرد توپوایزومراز I توسط مولکول های کوچک در انواع مختلف سرطان برای جلوگیری از تکثیر DNA و تقسیم سلول آن را به یک هدف دارویی مهم برای درمان سرطان تبدیل کرده است. در واقع هدف بیولوژیکی برخی از عوامل ضد سرطان، توپوایزومراز I است. هدف از تحقیق حاضر طراحی بیوانفورماتیکی ترکیب ضد سرطانی با پتانسیل مهار توپوایزومراز ۱ بر اساس ترکیب کنترل ZML-8 می باشد. روش ها: در این مطالعه، برای بررسی نحوه اتصال ترکیب طراحی شده به جایگاه فعال آنزیم توپوایزومراز I، ساختار لیگاند موردنظر با نرم افزار هایپرکم ترسیم شد. بعد نسخه سه بعدی آن به صورت فرمت pdb ذخیره شد تا برای بررسی و آنالیز در نرم افزار اتوداک و دیسکآوری مورد بررسی قرار گیرد. یافته ها: ترکیب اصلی مهارکننده آنزیم توپوایزومراز I در کنار پروتئین توپوایزومراز I قرار گرفت. این ترکیب با پیوند هیدروژنی به اسید آمینه TYR308 متصل شده است. همچنین این لیگاند دارای یک برهمکنش کاتیون  $\pi$  با اسید آمینه ARG376 و دو برهمکنش کاتیون  $\pi$ - با اسید آمینه LYS262 است ترکیب تغییر شکل یافته ضد سرطان با اسید آمینه های ARG376 و PRO358 و GLU255 دارای پیوند هیدروژنی است. در این لیگاند هیچگونه برهمکنش  $\pi$  وجود ندارد. نتیجه گیری: نتایج نشان میدهد، ترکیب تغییر شکل یافته همانند ترکیب کنترل ZML-8 قادر به اتصال با اسید آمینه ARG376 می باشد.

## کلمات کلیدی:

ternatin، مهارکننده، آنزیم، مهارکننده، آنزیم، طراحی، بیوانفورماتیکی، ترکیب ضد سرطانی، توپوایزومراز ۱

لینک ثابت مقاله در پایگاه سیویلیکا:

<https://civilica.com/doc/1979783>

