

عنوان مقاله:

بررسی اتصال کمپلکس مس به پروتئین بتالاکتوگلوبولین با روش داکینگ مولکولی

محل انتشار:

هفتمین کنفرانس بین المللی مطالعات میان رشته ای در نانو فناوری (سال: 1402)

تعداد صفحات اصل مقاله: 9

نویسندگان:

ساجده ابراهیم دمانندی - استاد دانشگاه فرهنگیان

پرینان بابائی - دانش آموز پایه دهم فرزنانگان یک

کیانا عبدالمحمدی - دانش آموز پایه دهم فرزنانگان یک

خلاصه مقاله:

بتالاکتوگلوبولین از پروتئین های اصلی آرزون شیر گاو می باشد، در شیر انسان یافت نمی شود و مقاومتش به پروتئازها سبب می شود که به طور کامل تجزیه نشده، این توپ ها به صورت آنتی ژن جذب شده و سیستم ایمنی را فعال نمایند. کمپلکس فلزی در واقع تقلیدی از مکان فعال آنزیم است که در آن فلز به کمک گروه های عاملی، عمل کاتالیز را انجام می دهد. در این پروژه اتصال کمپلکس مس به پروتئین بتالاکتوگلوبولین با روش داکینگ مولکولی و با استفاده از اتوداک ۴ بررسی گردید. ساختار کمپلکس بوسیله کمدر او رسم گردید و سپس بوسیله گوسین بهینه گردید. ساختار نهایی برهمکنش پروتئین با کمپلکس با روش بهینه سازی AutoDock Tools انجام شد. نتایج نشان می دهد که کمپلکس مس با اتصال به مکان ای توپ های ۱ و ۲ موجب پوشیده شدن توالی ها و عدم شناسایی آنها توسط سیستم ایمنی می گردند. یافته های بدست آمده نشان می دهد کمپلکس مس طراحی شده یا قوی ترین اتصال به مکان ای توپ دو را نشان می دهد. پوشانده شدن این محل بوسیله کمپلکس های مس یکی از دلایل کاهش حساسیت زایی پروتئین بتالاکتوگلوبولین پس از تیمار با کمپلکس مس است. همچنین نتایج انرژی آزاد بدست آمده نشان می دهد برهمکنش های هیدروفوب در اتصال کمپلکس ها نقش اصلی را دارند.

کلمات کلیدی:

بتالاکتوگلوبولین، کمپلکس مس، داکینگ مولکولی

لینک ثابت مقاله در پایگاه سیویلیکا:

<https://civilica.com/doc/2005429>

