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

عنوان مقاله:

بررسی خصوصیات دینامیک باقی مانده های جایگاه اتصال وارفارین–آزاپروپازون در پروتئین آلبومین سرم انسانی

محل انتشار:

مجله انفورماتیک سلامت و زیست پزشکی, دوره 6, شماره 3 (سال: 1398)

تعداد صفحات اصل مقاله: 9

نویسندگان:

امیرحسین ساعی نیا – Sc. Student in Laboratory Science, Laboratory Science Dept., Faculty of Paramedical, Tehran Medical Science, Islamic Azad University,. Tehran, Iran

محمد تقی زاده – Ph.D. in Bioinformatics, Biotechnology Dept., Faculty of Advance Science and Technology, Tehran Medical Science, Islamic Azad University, Tehran, Iran

مهدی علوی – Ph.D. in Cellular and Molecular Biology, Associate Professor, Agricultural Biotechnology Dept., National Institute of Genetic Engineering and Biotechnology (NIGEB), Tehran, Iran

خلاصه مقاله:

مقدمه: آلبومین سرم انسانی یکی از مهم ترین پروتئین های خون است که توانایی اتصال به گستره زیادی از مواد مختلف و داروهای مختلفی مانند وارفارین را دارد؛ بنابراین شناخت سرم آلبومین در مطالعات دارویی نقش بسیار مهمی دارد. در این پژوهش به مطالعه دینامیک باقی مانده های جایگاه اتصال وارفارین سرم آلبومین پرداخته شد. روش: ابتدا ساختار ۳ بعدی آلبومین (PDB ID: ۴G۰۴) از پایگاه داده RCSB دریافت شد. سپس به کمک بسته نرم افزاری گرومکس شبیه سازی دینامیک مولکولی در مدت ۳۰ نانوثانیه بر روی زنجیره آی این ساختار کریستالوگرافی انجام شد. نتایج: با استفاده از آنالیز RMSD که بر روی باقی مانده های جایگاه اتصال انجام شد، مشاهده شد که ۲ باقی مانده آرژینین ۱۸۶ و ۲۱۸ دارای تغییرات RMSD زیادی هستند، ۲ باقی مانده لیزین ۱۸۵ و ۱۹۰ تقریبا دارای تغییرات زیادی هستند؛ ولی از آرژینین ها کمتر است و باقی مانده های دیگر مانند گلیسین ۱۸۹ دارای تغییرات بسیار کمی هستند. تغییرات RMSD باقی مانده ها با سطح در دسترس حلال رابطه مستقیم دارد. نتیجه گیری: نتایج به دست آمده نشان داد که جایگاه اتصال وارفارین در آلبومین می تواند وضعیت های کنفورماسیونی متنوعی با توجه به دینامیک باقی مانده های خود بگیرد. این مسئله می تواند در طراحی دارو بسیار مهم باشد. در کل بر اساس نتایج، باقی مانده ها به ۳ دسته تقسیم شدند. از میان آن ها تریپتوفان ۲۱۴ که بر اساس مقالات مختلف یکی از مهم ترین باقی مانده های جایگاه اتصال به حساب می آید جزء کم تحرک ترین باقی مانده های جایگاه اتصال دسته بندی شد.

کلمات کلیدی:

Human Serum Albumin, Molecular Dynamics simulation, Sudlow site I, Azapropazone, RMSD, آلبومین سرم انسانی, شبیه سازی دینامیک مولکولی, جایگاه اتصال سادلو I, آزاپروپازون, آر ام اس دی

لینک ثابت مقاله در پایگاه سیویلیکا:

https://civilica.com/doc/2036510