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

عنوان مقاله:
مدل سازی سیستم پروتین سازی در پروکاریوت ها و تاثیر فیزیکی و شیمیایی محیط بر روی آن با استفاده از محاسبات مکانیکی مولکولی و کوانتومی QM/MM

محل انتشار:
همایش ملی یافته های نوین شیمی در صنعت پزشکی (سال: 1388)

تعداد صفحات اصل مقاله: 9

نویسندگان:
مازیار نوعی - *دانشکده شیمی ؛ دانشگاه آزاد اسلامی واحد علوم و تحقیقات تهران*

فاطمه ملامین - *دانشکده شیمی ؛ دانشگاه آزاد اسلامی واحد علوم و تحقیقات تهران*

حسین آقایی - *دانشکده شیمی ؛ دانشگاه آزاد اسلامی واحد علوم و تحقیقات تهران*

سیدمسعود هاشمی - *دانشکده تحصیلات تکمیلی، دانشگاه آزاد اسلامی واحد شهر ری*

خلاصه مقاله:
در این مقاله یک سیستم پروتین سازی در سلول های پروکاریونی توسط نرم افزارهای کامپیوتری Hyper و Gaussian و chem Office مدل سازی شده است. و ضمن شناسایی اجزاء اصلی پروتین سازی و نحوه اتصالات آن ها با یکدیگر، اثرات محیط شیمیایی و فیزیکی را برروی آن ها مورد مطالعه قرار داده، برای این منظور اتصالات آدنینی + فرمیل میتونین و ریبوزوم + mRNA و mRNA+tRNA و زنجیره پپتیدی tRNA +و ریبوزوم tRNA + را در برنامه کامپیوتری Hyper chem. مدل سازی کرده و محاسبات مکانیک مولکولی را در محیط آبی با غلظت مختلف در دماهای مختلف برروی آنها انجام دادیم و سپس توسط نرم افزار Gaussian98 در سطح تئوری HF/3-21G و HF/6-31G و HF/6-31G* آن ها را از لحاظ هندسی بهینه سازی کرده و از خروجی های Gaussian نتیجه گرفتیم که اتصالات فوق در محیط گازی پایدار نبوده و پایداری آن ها در محیط آبی بیشتر می باشد، و همچنین در اتصال tRNA به فرمیل متیونین، پیوند کربن از باز آلی آدنین در tRNA وهمچنین نیتروژن از عامل (C-N) NH2 دارای پر شدت ترین ارتعاش بوده و بعد از آن اسید آمینه متیونین در گروه فنیل (CHO-) دارای پیوند (c = o) با ارتعاش قوی می باشد، این دو از خروجی گوسین و براساس محاسبات فرکانس نتیجه شده اند و ناپایدارترین پیوندها در این اتصال می باشند.

کلمات کلیدی:
ریبوزوم-فرمیل متیونین-گوسین- اسید آمینه- پروکاریوت- آدنین - مدل سازی

لینک ثابت مقاله در پایگاه سیویلیکا:
https://civilica.com/doc/71098