



عنوان فارسی مقاله :

مدل سازی مولکولی و طراحی دارو

عنوان انگلیسی مقاله :

Molecular modelling and drug design

Associate editor: D. Shugar

توجه !



این فایل تنها قسمتی از ترجمه میباشد.

برای تهیه مقاله ترجمه شده کامل با فرمت ورد (قابل ویرایش) همراه با نسخه انگلیسی

مقاله، [اینجا](#) کلیک نمایید.

## بخشی از ترجمه مقاله

### 2. Modelling challenge

The current explosion in gene databases and “structural genomics” eventually will provide essential sequence information, but the lack of knowledge of the laws of protein folding generally prohibits the inference of structure from sequence. Targeted studies, which seek to understand the basic chemistry and physiology of a disease, are more promising. For example, human immunodeficiency virus (HIV) proteinase inhibitor development (Appelt, 1993; Kaldor et al., 1997) surely must be one of the most spectacular successes in the brief history of structure-based drug design. A novel approach scans a pathological vector using the tools of molecular biology; of the many relevant proteins produced, a few can be isolated, crystallized, and structurally elucidated. For example, *Pyrobaculum aerophilum* is reported to be a cofactor for the Rev and Rex transactivator proteins of HIV-1 and T-cell leukemia virus I. It has been studied (Peat et al., 1998) at 1.75 Å resolution and identified as a target for chemical interdiction. The structures of normal and pathological molecules can be compared and compounds designed to inhibit pathogenic enzymes or receptors selectively. *Defining the target is Challenge #1.*



### 2- چالش های مدل سازی:

انفجار کنونی پایگاه های داده ژن و ژنومیک ساختاری بالاخره اطلاعات مهمی راجع به توالی ارائه می دهد، اما عدم دانش و آگاهی در مورد قوانین تاخوردگی پروتئین عموماً مانع از استنتاج ساختار از توالی می گردد. مطالعات هدفمند که خواهان شناخت و فهم شیمی و فیزیولوژی پا به در مورد بیماری هستند، امیدوار کننده تر می باشند. به طور مثال ویروس توسعه عامل بازدار پروتئیناز ویروس کمبود یا نقص ایمنی انسانی (VIH) بایستی یکی از موفقیت های بسیار چشمگیر در تاریخچه مختصر طراحی دارو بر اساس ساختار پنداشته شود. شیوه جدید بردار پاتولوژیکی را با استفاده از ابزارهای زیست شناسی مولکولی اسکن می کند، از میان تعداد زیادی از پروتئین های وابسته تولید شده، تعداد محدودی را میتوان ایزوله، متبلور، و از لحاظ ساختاری روشن نمود. به طور مثال abor yP mulihporea muluc کوفاکتور پروتئین های veR و xeR ویروس لوسمی سلول آد I I-VIH می باشد. آن در رزولاسیون 0A57.1 مطالعه شده و به عنوان هدف بازدارندگی شیمیایی شناسایی گردید. ساختارهای مولکولهای نرمال و پاتولوژیکی را می توان با هم مقایسه و با هم ترکیب نمود و نهایتاً به وسیله آنها از کار آتریم ها یا گیرندگان پاتولوژیکی گردید. تعریف هدف چالش # 1 به شمار می رود.

توجه!

این فایل تنها قسمتی از ترجمه میباشد.

برای تهیه مقاله ترجمه شده کامل با فرمت ورد (قابل ویرایش) همراه با نسخه انگلیسی مقاله، [اینجا](#) کلیک نمایید.

همچنین برای مشاهده سایر مقالات این رشته [اینجا](#) کلیک نمایید.