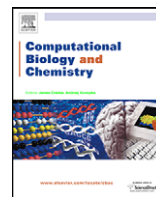


بخشی از ترجمه مقاله



عنوان فارسی مقاله :

بازدارنده های بالقوه دارویی شکل نورامینیداز آنفلونزا گروه ۱

شناسایی شده به روش طراحی دارو به کمک کامپیوتر

عنوان انگلیسی مقاله :

Potential drug-like inhibitors of Group 1 influenza neuraminidase
identified through computer-aided drug design

Jacob D. Durrant^{a,*}, J. Andrew McCammon^{b,c,d}

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.

2. Material and methods

2.1. Accounting for protein flexibility

To account for protein flexibility, we drew upon a molecular dynamics simulation of neuraminidase that has been described previously (Cheng et al., 2008). Protein conformations extracted from this 40-ns simulation were clustered into 27 groups by root-mean-square-deviation (RMSD) conformational clustering using the *gromos* clustering algorithm, as implemented in the GRO-MOS++ analysis software (Daura et al., 1999; Christen et al., 2005). In brief, an RMSD distance was calculated for each pair of protein conformations extracted from the MD simulation. Those pairs with associated RMSD distances greater than 1.3 Å were discarded. The single conformation most frequently present in the remaining pairs, together with the other corresponding conformation of each pair, were merged into a list of conformations called the first cluster.



1. 2 حسابداری انعطاف پذیری پروتئین به منظور بررسی انعطاف پذیری پروتئین، از روش شبیه سازی دینامیک مولکولی نورامینیداز استفاده می کنیم که در بخش قبل توصیف شده است. ترکیب و صورت بندی پروتئین استخراج شده از شبیه سازی sn04 به روش دسته بندی صورت بندی DSMR با استفاده از الگوریتم دسته بندی somorg ، به 72 گروه تقسیم شد، این الگوریتم در نرم افزار تحلیل SOM - ORG ++ اجرا گردید. در مجموع، فاصله DSMR در هر جفت صورت بندی پروتئین استخراج شده از شبیه سازی DM محاسبه گردید. جفت هایی با DSMR وابسته با فاصله بیشتر از 3.1 Å رها گردید. صورت بندی موجود در جفت های باقیمانده به همراه سایر صورت بندی های نظیر هر جفت در لیست صورت بندی به نام دسته اول باهم تلفیق گردید. صورت بندی و ترکیب دسته اول، از مخزن ترکیبات استخراج شده از شبیه سازی DM حذف گردید و فرایند تا زمانی تکرار گردید که هیچ گونه ترکیبی باقی نماند. مرکز هر دسته انتخاب، و بدین طریق 72 ساختار پروتئینی منحصر به فرد که نمونه بسیاری از ترکیبات پروتئینی نمونه برداری شده در طول شبیه سازی هستند، به دست آمد .

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.