



بخشی از ترجمه مقاله

عنوان فارسی مقاله :

ابعاد مکانیکی فعالیت آنزیمی نیتریل هیدراتاس. شبیه سازی های

دینامیکی مولکولی هدایت شده Pseudonocardia thermophila JCM 3095

عنوان انگلیسی مقاله :

Mechanical aspects of nitrile hydratase enzymatic activity.

Steered molecular dynamics simulations of Pseudonocardia

thermophila JCM 3095



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

4. Conclusions

For the first time the biotechnologically important enzyme nitrile hydratase has been investigated using computer modelling and the CHARMM force field. The non-standard Steered MD method, with an external force applied to the docked substrate/product, has been used to generate plausible transport paths for a substrate ACN and the product ACA. The model NHase is stable during forced unbinding of ligands. The average unbinding force is of the order of 120pN, while it is 80 pN when pulling a ligand through the bulk water. The maximum interaction forces (less than 300 pN), both for ACN and ACA are related to overcoming a steric barrier created by the pPhe37 residue. The brute-force dissociation of ligands in a random direction requires forces at least a factor of 2-3 higher

4. نتیجه گیری ها

برای نخستین بار ، آنزیم مهم نیتریل هیدراتاس با استفاده از مدلسازی کامپیوتری و میدان نیروی CHARMM مورد بررسی قرار گرفته است. روش md هدایت شده ی غیر استاندارد ، با یک نیروی خارجی برای زیرلایه ی کوتاه شده یا محصول اعمال شد ، که برای تولید مسیرهای انتقال ممکن برای یک زیرلایه ی ACN و محصول ACA ، به کار رفته است. مدل NHase در طول آزاد کردن اجباری پیوند لیگاندها پایدار است. نیروی آزاد کننده ی متوسط با ساختار 120Pn است، در حالیکه آن در زمانیکه یک لیگاند را از طریق آب حجمی می کشد ، 80 pN است. نیروهای فعل و انفعال ماکسیمم (کمتر از 300 pN) هر دو برای ACN و ACA به غلبه بر یک مانع فضایی ایجاد شده از طریق باقیمانده ی β Phe37 مربوط هستند. تجزیه ی نیروی سخت لیگاندها در یک مسیر تصادفی به نیروهایی در حداقل یک فاکتور 2-3 بالاتر نیاز دارد.



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.

برای جستجوی جدیدترین مقالات ترجمه شده، [اینجا](#) کلیک نمایید.