

ملخص

في هذه الدراسة قمنا باختبار تأثير كل حمض نووي في سلسلتي الأحماض الأمينية اللتين تربطان بين أجزاء بروتين الزنك (TGEKP) و (TGQKP) على طاقة ربط بروتين الزنك بالموقع المحدد له على الحمض الريبوزي النووي المنزوع الأوكسجين. تم تكوين عشرة طفرات من بروتين Zif268 ومن ثم حساب طاقة الربط لكل طفرة على حده مع نفس الموقع على الحمض الريبوزي النووي المنزوع الأوكسجين باستخدام طريقة (Molecular Mechanics Generalized Born Surface Area).

مقارنة مع البروتين (Zif268) طفرة واحدة (T56Y) أنتجت طاقة ربط أقل ب (20.7 kcal/mol) ، ثلاث طفرات (Q30E, E58Q and P60A) أنتجت طاقة ربط اعلى ب (25.5, 18.2, 27.6 kcal/mol على الترتيب)، ستة طفرات (T28A, G29P, K31D, P32G, G57V, K59P) أنتجت طاقة ربط قريبة من طاقة ربط بروتين (Zif268) مع أخذ قيمة الانحراف المعياري بعين الاعتبار.

تم تفكيك قيم طاقة ربط البروتينات مع الحمض الريبوزي النووي المنزوع الأوكسجين الى ثلاثة من مكوناتها الأساسية : الطاقة الإكتروستاتيكية، طاقة فان دير فالس، و الإسهامات الاكتروستاتيكية لطاقة الإذابة. قيم طاقة الربط للعشر طفرات كان لها أقوى ارتباط مع مجموع الطاقة الإلكتروستاتيكية.

وجود طفرة واحدة فقط من أصل عشرة لها طاقة ربط أقل ، يشير إلى أن السبب الرئيسي لحفظ تسلسل الأحماض الأمينية (TGEKP) قد يعود لأهمية هذا التسلسل في وظائف حيوية أخرى عدى عن ارتباط بروتين الزنك بموقعه المحدد على الحمض الريبوزي النووي المنزوع الأوكسجين.