أداة لحساب المسافات التلامسية ل لأحماض الأمينية في عتبة مسافة مختلفة باستخدام ملف PDB

إعداد

افنان عبدالرحمن سلامة العمراني

رسالة مقدمة لاستكمال متطلبات درجة الماجستيرفي علم الجينوم والتقنيه الحيويه

تحت إشراف

د. احمد فيروزاكرم

كلية العلوم
جامعة الملك عبد العزيز
جده- المملكة العربية السعودية
١٤٤٣هـ- ٢٠٢١م

أداة لحساب المسافات التلامسية ل لأحماض الأمينية في عتبة مسافة مختلفة باستخدام ملفPDB

إعداد الطالبة

افنان عبدالرحمن سلامة العمراني

الملخص

تعتمد وظيفة البروتينات على التفاعل مع روابطها ، ومن المهم جدًا بين ligands Mannoseالذلك يعد تحديد ملامسات الأحماض الأمينية أمرًا مهمًا لفهم البروتينات السكرية. من أجل فهم التفاعلات التي تحسب اتصالات الأحماض الأمينية على عتبات مسافة مختلفة مطلوبة ، يمكن أيضًا تحديد مخلفات موقع الربط للبروتينات من قواعد البيانات ، أو أدوات التصور ، أو العديد من خوادم الويب الأخرى التي تم تطويرها مسبقً ولكن يصبح هذا الأمر مهيبًا بشكل كبير عندما تحتوي مجموعة كبيرة من البروتينات لتحليلها.

بمساعدة هذه الأداة ، يمكن للمستخدم الحصول على بقايا الربط بعد تحميل ملف PDB. بالإضافة إلى ذلك ، يمكنه أيضًا إنشاء تفاصيل ذرية عن جهات الاتصال بما في ذلك مسافات بقايا موقع الربط من هياكل PDB.

بنك بيانات البروتين (PDB) هو مستودع للهياكل ثلاثية الأبعاد للجزيئات البيولوجية الكبيرة التي تحتوي على إحداثيات ذراتها

باستخدام إحداثيات ذرتين ، يمكن لهذه الأداة حساب المسافة بينهما.

يتم تعريف البقايا على أنها بقايا ربط إذا كانت المسافة بين ذرات الشريك المتفاعل أقل من مسافة معينة مقطوعة عند تحميل ملف البروتين ثلاثي الأبعاد مانوز ذو الأهمية والخيار المحدد لعتبة المسافة من قبل

المستخدم ، يبحث ContMann في ملف PDB عن سلاسل البروتين وسلسلة Ligand ذات الأهمية وعدد نماذج البروتين (إذا كان البروتين متعدد النماذج). في حالة وجود أكثر من نموذج واحد ، يوفر ContMann خيارًا لتحديد وتحليل النموذج المطلوب الموجود في ملف بنك بيانات البروتين (PDB) الذي تم تحميله. ثم يحسب ContMann المسافة بين ذرات سلسلة البروتين المختارة وذرات الشريك المتفاعل ، وعندما تنخفض هذه المسافة أقل من أو تساوي عتبة المسافة المحددة ، تعتبر هذه البقايا بمثابة بقايا ملزمة.

واجهة الويب: تم تطوير واجهة الويب للإصدار الحالي من ContMann باستخدام لغة البرمجة النصية HTML و JavaScript و CGI-PERL. يحتوي على الصفحة الرئيسية حيث تم ذكر وصف هذه الأداة ، وخيار تحميل ملف pdb وزر الإرسال

TOOL TO CALCULATE AMINO ACID CONTACT DISTANCES AT DIFFERENT DISTANCE THRESHOLD USING BATCH PDB FILE

By

Afnan Abdulrahman Alomrani

A thesis Partial Fulfillment of the Requirements for the Degree of Master of Science (Biological sciences/ Ge-nomics and Biotechnology)

Supervised by

Dr. Ahmad Firoz

Abstract

Protein function depends on interaction with their ligands and mannose is one of the important ligands for understanding glycoprotein, so often calculating the binding site residues in protein required using PDB file at different distance threshold. To study interaction with mannose with particular protein chain of complex, researchers need to parse different available tools or databases output for binding residues. So, this tool has been developed for calculating contact distances in amino acid of proteins at distance threshold using PDB file. ContMann can calculate all binding-site residues in the protein at a set distance from its coordinate present in pdb file, Additionally, it can also generate atomic details of contacts including distances of binding-site residue. ContMann tool is freely available at: http://procarb. org/procarbdb/cfind-contact2.html.
http://procarb. org/procarbdb/cfind-contact2.html