Uniwersytet Wrocławski

Repozytorium

Plik pochodzi z repozytorium Wydziału Chemii Uniwersytetu Wrocławskiego

Insight into the orientational versatility of steroid substrates - a docking and molecular dynamics study of a steroid receptor and steroid monooxygenase.

Autorzy

Anna Panek

Alina Świzdor

Natalia Milecka-Tronina

Jarosław J. Panek

Rok wydania

2017

Czasopismo

Journal of Molecular Modeling

Numer woluminu

23

Strony

96/1-96/8

DOI

10.1007/s00894-017-3278-z

Kolekcja

Naukowa

Język

Angielski

Typ publikacji

Artykuł

Streszczenie

Numerous steroids are essential plant, animal, and human hormones. The medical and industrial applications of these hormones require the identification of new synthetic routes, including biotransformations. The metabolic fate of a steroid can be complicated; it may be transformed into a variety of substituted derivatives. This may be because a steroid molecule can adopt several possible orientations in the binding pocket of a receptor or an enzyme. The present study, based on docking and molecular dynamics, shows that it is indeed possible for a steroid molecule to bind to a receptor binding site in two or more orientations (normal, head-to-tail reversed, upside down). Three steroids were considered: progesterone, dehydroepiandrosterone, and 7-oxo-dehydroepiandrosterone. Two proteins were employed as hosts: the human mineralocorticoid receptor and a bacterial Baeyer–Villiger monooxygenase. When the steroids were in nonstandard orientations, the estimated binding strength was found to be only moderately diminished and the network of hydrogen bonds between the steroid and the host was preserved.

Słowa kluczowe

steroids, progesterone, dHEA, baeyer-Villiger monooxygenase, molecular docking, molecular dynamics

Licencja otwartego dostępu

CC-BY

Licencja na prawach której można swobodnie kopiować, rozprowadzać, zmieniać i remiksować objęty prawem autorskim utwór (Utwór-przedmiot prawa autorskiego) pod warunkiem podania imienia i nazwiska autora utworu pierwotnego oraz źródła pochodzenia utworu.

Pełny tekst licencji:
https://creativecommons.org/licenses/by/3.0/pl/legalcode

Adres publiczny

http://dx.doi.org/10.1007/s00894-017-3278-z

Strona internetowa wydawcy

http://link.springer.com

Plik został wygenerowany dnia 2026-11-15 02:35:51
Adres w repozytorium https://old.chem.uni.wroc.pl/pl/repozytorium/Z8quhMz.