

# SID



سرویس های ویژه



سرویس ترجمه تخصصی



کارگاه های آموزشی



بلاگ مرکز اطلاعات علمی



سامانه ویراستاری STES



فیلم های آموزشی

## کارگاه های آموزشی مرکز اطلاعات علمی



مقاله نویسی علوم انسانی

مقاله نویسی علوم انسانی



اصول تنظیم قراردادها

اصول تنظیم قراردادها



آموزش مهارت های کاربردی در تدوین و چاپ مقاله

آموزش مهارت های کاربردی در تدوین و چاپ مقاله



## پیشگویی ساختار نانوبادی دو ظرفیتی با کمک نرم افزار MODELLER و بررسی تاثیر انواع لینکر بر میزان تغییر تمایل نانوبادی دو ظرفیتی نسبت به آنتی ژن

ارغوان سلیمانی زاده\*<sup>۱</sup>، هدا آیت<sup>۲</sup>، علی محمد احدی<sup>۳</sup>

(\*): دانشجوی کارشناسی ارشد ژنتیک دانشگاه شهرکرد a.soleimanizadeh@gmail.com

۳ و ۲) عضو هیئت علمی دانشگاه شهرکرد گروه ژنتیک

چکیده:

ناحیه متغیر زنجیره سنگین آنتی بادی شتری (VHH یا نانوبادی) خواص منحصر بفردی در مقایسه با آنتی بادی مشتق شده از IgG معمول دارد. این نانوبادی فاقد زنجیره سبک است و بنابراین کوچکترین قطعه ای است که قادر است با آنتی ژن برهمکنش دهد. مطالعات مختلف نشان داده اند که اشکال دو ظرفیتی تمایل بالاتری برای آنتی ژن دارند. در مطالعه حاضر، ساختار سه بعدی نانوبادی cAb-RN05 و RNase از بانک اطلاعاتی PDB گرفته شد. ساختار سه بعدی اشکال دو ظرفیتی با لینکر لولای آنتی بادی های IgG1b، IgG2c و IgG3 و لینکرهای مصنوعی پلی گلاپسین و پلی آلانین، توسط نرم افزار MODELLER پیشگویی شد. Docking اشکال مختلف نانوبادی توسط نرم افزار HEX انجام شد. تفاوت قابل توجهی بین انرژی حاصل از Docking شکل تک ظرفیتی با اشکال دو ظرفیتی مشاهده شد و میزان این انرژی برای اشکال دو ظرفیتی کمتر بود. این نتایج نشان می داد که لینکرهای طبیعی تمایل بهتری برای اتصال به آنتی ژن دارند. برای تایید نتایج حاصل از Docking اشکال مختلف نانوبادی cAb-Lys3 نیز با آنزیم لیزوزیم انجام شد و نتایج حاصل تایید شد. بنابراین می توان نتیجه گرفت که اشکال دو ظرفیتی در مقایسه با نوع تک ظرفیتی قابلیت بالاتری در برهمکنش و مهار آنتی ژن داشته در این بین اشکال ایجاد شده به کمک لینکرهای طبیعی قدرت اتصال بهتری دارند.

کلمات کلیدی: نانوبادی، Modeller، لینکر، Docking



## **Predicting three Dimensional structure of bivalent nanobody with MODELLER software and analyze the effect of different linkers to the affinity of bivalent nanobodies to the antigen.**

Arqavan Soleimanizadeh<sup>\*1</sup>, Hoda Ayat<sup>2</sup>, Ali Mohammad Ahadi<sup>3</sup>

1) Msc candidate, ShahreKord University

2,3) Faculty member, Department of Genetics, ShahreKord University

### Abstract:

Recombinant single domain antibody fragments (VHHs or nanobody) that derive from the unusual camelid heavy chain antibodies have favourable properties compared with antibodies prepared from conventional IgG. These antibodies lack light chains so they are the smallest intact antigen-binding domain fragment of antibodies. Several studies have shown that bivalent formats of nanobody have stronger affinity to antigens. In our research three Dimensional structures of the VHH and Rnase were taken from the PDB databank. Two nanobodies were tethered by the hinge of natural camel antibodies, polyserin, polyglysin and polyalanin linkers to. Structure of bivalent formats was predicted by Modeller software. Protein Ligand Docking was done for the target proteins and the energy value obtained using the HEX Docking software. Bivalent formats of antibodies were chosen as the best formats based on the energy values. We tried to improve the binding efficiency and steric compatibility of the antibodies. Several modifications were made to the probable functional groups which were interacting with the receptor molecule. To confirm the results, Docking of different format of another nanobody was done with lysozyme enzyme. The result was confirmed with this assay. In conclusion, bivalent formats, especially formats with natural linkers, had more affinity to antigens.

Key words: Nanobody, Modeller, linker, Docking

# SID



سرویس های ویژه



سرویس ترجمه تخصصی



کارگاه های آموزشی



بلاگ مرکز اطلاعات علمی



سامانه ویراستاری STES



فیلم های آموزشی

## کارگاه های آموزشی مرکز اطلاعات علمی



مقاله نویسی علوم انسانی



اصول تنظیم قراردادها



آموزش مهارت های کاربردی در تدوین و چاپ مقاله