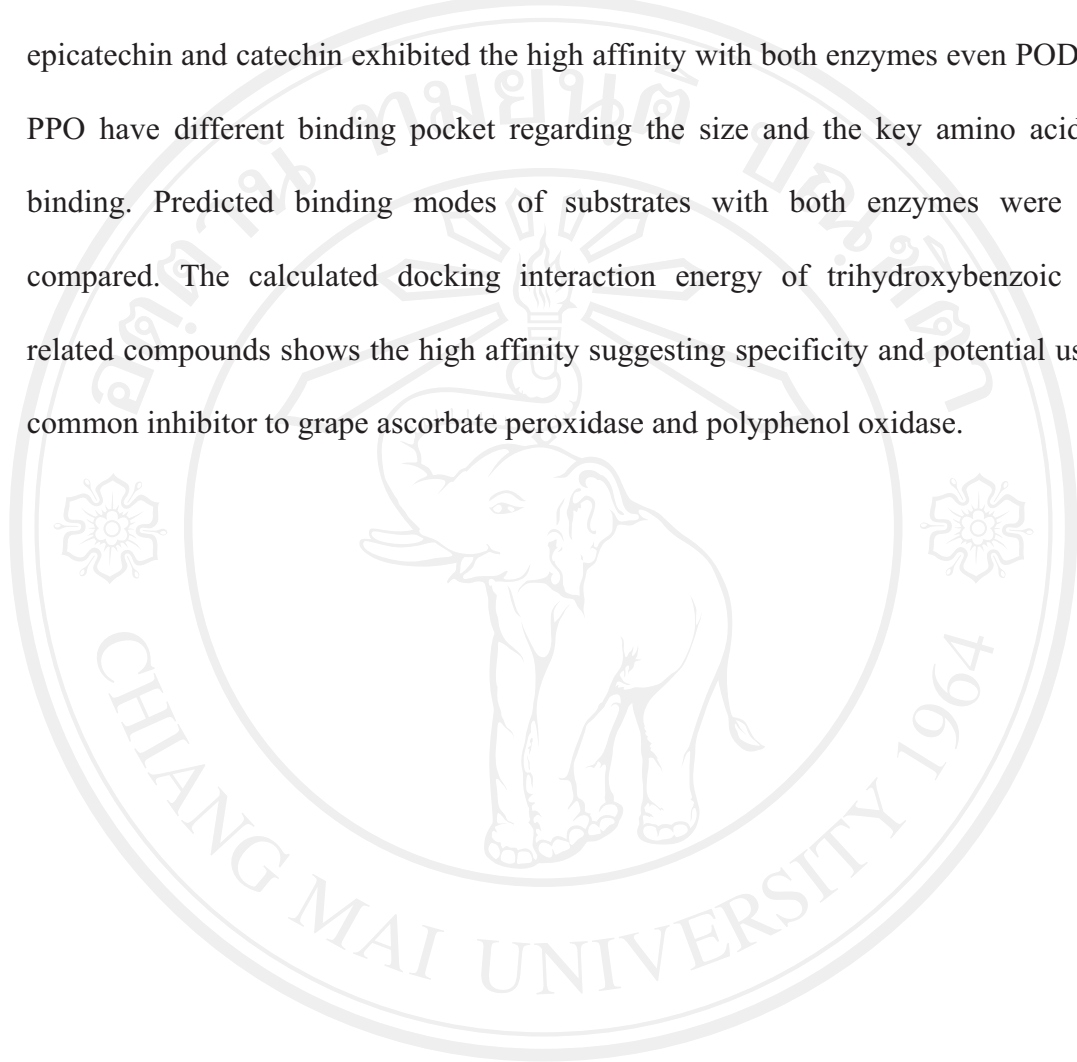


Thesis Title	Substrate Specificity and Active Site Comparison in Molecular Modeling of Active Sites of Peroxidase and Polyphenol Oxidase	
Author	Ms. Prontipa Nokthai	
Degree	Master of Science (Bioinformatics)	
Thesis Advisory Committee	Asst. Prof. Dr. Lalida Shank	Chairperson
	Dr. Vannajan Sanghiran Lee	Member

ABSTRACT

Peroxidases (POD) and polyphenol oxidase (PPO) are well known enzymes involved in the enzymatic browning reaction of fruits and vegetables with different catalytic mechanisms. Both enzymes have some common substrates, but each also has its specific substrates. In our computational study, the amino acid sequence of grape peroxidase (ABX) was used for the construction of models employing homology modeling method based on the X-ray structure of cytosolic ascorbate peroxidase from pea (PDB ID:1APX), whereas the model of grape polyphenol oxidase was obtained directly from the available X-ray structure (PDB ID:2P3X). Molecular docking of

common substrates of these two enzymes was subsequently studied and found that epicatechin and catechin exhibited the high affinity with both enzymes even POD and PPO have different binding pocket regarding the size and the key amino acids in binding. Predicted binding modes of substrates with both enzymes were also compared. The calculated docking interaction energy of trihydroxybenzoic acid related compounds shows the high affinity suggesting specificity and potential use as common inhibitor to grape ascorbate peroxidase and polyphenol oxidase.



ลิขสิทธิ์มหาวิทยาลัยเชียงใหม่
Copyright© by Chiang Mai University
All rights reserved

ชื่อเรื่องวิทยานิพนธ์	ความจำเพาะต่อซับสเตรตและการเปรียบเทียบตำแหน่ง กัมมันต์ในการจำลองแบบเชิงโมเลกุลของตำแหน่ง กัมมันต์ของเพอร์ออกซิเดสและพอลิฟีนอลออกซิเดส	
ผู้เขียน	นางสาวพรทิพา นกไทย	
ปริญญา	วิทยาศาสตรมหาบัณฑิต (ชีวสารสนเทศศาสตร์)	
คณะกรรมการที่ปรึกษาวิทยานิพนธ์	ผศ. ดร. ลลิตา แซงค์ ดร. วรรณจันทร์ แสงหิรัญ ลี	ประธานกรรมการ กรรมการ

บทคัดย่อ

เพอร์ออกซิเดส และพอลิฟีนอลออกซิเดสเป็นเอนไซม์ที่เกี่ยวข้องกับปฏิกิริยาการเกิดสีน้ำตาลในผักและผลไม้ ด้วยการเร่งปฏิกิริยาที่แตกต่างกัน ซึ่งทั้งสองเอนไซม์สามารถใช้ซับสเตรตร่วมกันได้ แต่มีซับสเตรตบางตัวที่จำเพาะกับเอนไซม์แต่ละชนิด การศึกษาโดยใช้วิธีทางเคมีคอมพิวเตอร์โดยใช้ลำดับกรดอะมิโนของเพอร์ออกซิเดสขององุ่น (ABX) สร้างแบบจำลองด้วยวิธีโฮโมโลยี ตาม โครงสร้างเอ็กซ์เรย์เพอร์ออกซิเดสของถั่ว (PDB ID: 1APX) และโครงสร้างเอ็กซ์เรย์พอลิฟีนอลออกซิเดส ขององุ่น (PDB ID: 2P3X) ถูกนำมาใช้ในการศึกษาด้วยวิธีโมเดลเชิงโมเลกุล โดยใช้วิธีการด็อกกิ้งระหว่างซับสเตรตที่เหมือนกันของเอนไซม์ทั้งสองชนิด และพบว่าซับสเตรตอิพิคาเทชินและคาเทชินมีความสามารถในการยึดจับสูงกับทั้งสองเอนไซม์ แม้ว่าเพอร์ออกซิเดสและพอลิฟีนอลออกซิเดสมีขนาดโพรงที่ใช้ในการยึดจับ และกรดอะมิโนที่ยึดจับต่างกัน รูปแบบในการยึดจับของซับสเตรตกับทั้งสองเอนไซม์ที่ทำนายได้ยังถูกนำมาเปรียบเทียบกับ พลังงานปฏิสัมพันธ์จากวิธีด็อกกิ้งที่คำนวณได้ของสารประกอบกรดไตรไฮดรอกซีเบนโซอิกแสดงความสามารถในการยึดจับสูง ทั้งในความจำเพาะและศักยภาพ เป็นข้อเสนอแนะเพื่อใช้เป็นตัวบ่งชี้ที่เหมือนกันของเพอร์ออกซิเดส และพอลิฟีนอลออกซิเดสขององุ่น