

静电和疏水效应对TGEV主蛋白酶二聚体稳定性的影响

郑柯文; 俞庆森; 曾敏; 马国正; 王艳花; 张兵

浙江大学理学院化学系, 杭州 310027; 浙江大学宁波理工学院 分子设计与营养工程重点实验室, 宁波 315100

摘要:

从TGEV 3CL蛋白酶二聚体结构出发, 研究了TGEV 3CL蛋白酶二聚体单体之间的静电和疏水相互作用. 蛋白质的静电相互作用通过有限差分方法求解Poisson-Boltzmann方程得到, 疏水相互作用通过分析溶剂可及性表面模型得到. 考察了不同pH值对TGEV 3CL蛋白酶二聚体静电和疏水相互作用的影响, 在pH值为5.5~8.5时, 二聚体静电相互作用能、静电去溶剂化能和疏水自由能都较小, 表明在该条件下静电和疏水相互作用有利于二聚体的稳定存在, 这符合实验结晶所需条件. pH值对静电去溶剂化能的影响大于疏水自由能, 表明静电作用是造成强酸或强碱条件下二聚体不能稳定存在的主要原因.

关键词: TGEV 3CL蛋白酶二聚体 静电作用 疏水作用 pH值

收稿日期 2003-11-11 修回日期 2004-02-17 网络版发布日期 2004-06-15

通讯作者: 曾敏 Email: zengmin@nit.net.cn

本刊中的类似文章

Copyright © 物理化学学报

扩展功能

本文信息

PDF(1799KB)

服务与反馈

把本文推荐给朋友

加入我的书架

加入引用管理器

引用本文

Email Alert

文章反馈

浏览反馈信息

本文关键词相关文章

▶ TGEV 3CL蛋白酶二聚体

▶ 静电作用

▶ 疏水作用

▶ pH值

本文作者相关文章

▶ 郑柯文

▶ 俞庆森

▶ 曾敏

▶ 马国正

▶ 王艳花

▶ 张兵