

研究论文

SET区域Rubisco赖氨酸甲基化转移酶催化赖氨酸多重甲基化的量子力学研究

蒋彦可^a 邹建卫^{*},^b 卢运祥^a 蒋勇军^b 俞庆森^a

(^a浙江大学化学系 杭州 310027)

(^b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 315104)

收稿日期 2008-4-1 修回日期 2008-9-26 网络版发布日期 2009-3-14 接受日期 2008-11-3

摘要

用从头计算和DFT方法计算S-腺苷甲硫氨酸多重甲基化赖氨酸的反应机理. 气相中非催化反应的能垒比较低, 反应势能剖面类似于SN₂反应, 而在电介质中, 反应能垒很高. 在B3LYP/6-31G*和ONIOM (MP2: B3LYP)水平, 研究了Rubisco大亚基甲基转移酶活性位点的三个残基催化转移甲基到赖氨酸反应的过程. 在ONIOM (MP2: B3LYP)水平, 预测的反应能垒为82.8 kJ/mol, 与从实验得到的87.4 kJ/mol接近. 计算结果表明, 酶对过渡态并没有特殊的稳定作用, 主要通过为反应物提供一个没有溶剂的环境, 用临近的残基把亲电和亲核的底物连接在一起, 进而促使甲基化反应的进行.

关键词

[赖氨酸甲基化](#) [甲基化转移酶](#) [S-腺苷甲硫氨酸](#) [洋葱算法](#) [从头计算](#)

分类号

DOI:

通讯作者:

邹建卫 jwzou@nit.net.cn

作者个人主页:

蒋彦可^a 邹建卫^{*};^b 卢运祥^a 蒋勇军^b 俞庆森^a

扩展功能

本文信息

▶ [Supporting info](#)

▶ [PDF](#) (738KB)

▶ [\[HTML全文\]](#) (0KB)

▶ [参考文献\[PDF\]](#)

▶ [参考文献](#)

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](#)

相关信息

▶ [本刊中 包含 “](#)

[赖氨酸甲基化” 的相关文章](#)

▶ [本文作者相关文章](#)

· [蒋彦可,邹建卫,路运祥,蒋勇军,俞庆森](#)