

引用信息: Xie Ai-Hua; Li Bo-Yu; Liao Chen-Zhong; Li Zhi-Bin; Lu Xian-Ping; Shi Le-Ming; Zhou Jia-Ju. Acta Phys. -Chim. Sin., 2004, 20(06): 569-572 [谢爱华; 李伯玉; 廖晨钟; 李志斌; 鲁先平; 石乐明; 周家驹. 物理化学学报, 2004, 20(06): 569-572]

[本期目录](#) | [下期目录](#) | [过刊浏览](#) | [高级检索](#)

[\[打印本页\]](#) [\[关闭\]](#)

## HDAC对接研究: 苯甲酰胺类抑制剂结合方式推测

谢爱华; 李伯玉; 廖晨钟; 李志斌; 鲁先平; 石乐明; 周家驹

中国科学院过程工程研究所, 北京 100080; 深圳微芯生物科技有限公司, 深圳 518057

### 摘要:

通过计算机模拟的对接过程研究, 发现了MS-275—一种苯甲酰胺类的组蛋白去乙酰酶(HDAC)抑制剂与酶的可能的全新结合方式. 这种结合方式与已经阐明的组蛋白去乙酰酶类似蛋白(HDLP)与曲古柳菌素A(trichostatin A, TSA)和suberoylanilide hydroxamic acid(SAHA)形成的复合物晶体结构中配体与酶的作用方式完全不同. 从对接结果看, MS-275的作用靶点在酶活性口袋的最狭窄部位, 而不是直接作用于锌离子. 这似乎能够解释MS-275的低毒性特点, 并且为设计和筛选全新的HDAC抑制剂提供了新思路.

关键词: 组蛋白去乙酰酶(HDAC) 组蛋白去乙酰酶类似蛋白(HDLP) 曲古柳菌素A(TSA) 对接 MS-275

收稿日期 2004-02-24 修回日期 2004-03-23 网络版发布日期 2004-06-15

通讯作者: 周家驹 Email: jjzhou@lcc.icm.ac.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\(863KB\)](#)

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

▶ [组蛋白去乙酰酶\(HDAC\)](#)

▶ [组蛋白去乙酰酶类似蛋白\(HDLP\)](#)

▶ [曲古柳菌素A\(TSA\)](#)

▶ [对接](#)

▶ [MS-275](#)

本文作者相关文章

▶ [谢爱华](#)

▶ [李伯玉](#)

▶ [廖晨钟](#)

▶ [李志斌](#)

▶ [鲁先平](#)

▶ [石乐明](#)

▶ [周家驹](#)