

研究论文

应用MM/PBSA方法研究CDK2活性口袋内溶剂水分子对CDK2-配体结合自由能的影响

杨丽君^{a,b} 贾若^a 杨胜勇^{*,a}

(^a四川大学华西医院 生物治疗国家重点实验室 成都 610041)

(^b西华师范大学化学化工学院 南充 637002)

收稿日期 2008-6-10 修回日期 2008-8-27 网络版发布日期 2009-2-24 接受日期 2008-10-22

摘要

应用MM/PBSA方法研究了CDK2活性口袋内溶剂水分子对CDK2-配体结合自由能的影响. 结果表明, 活性口袋内溶剂水分子对CDK2-配体相互作用自由能有一定的贡献, 其贡献的大小随配体不同而有所差异, 导致这种差异的主要原因是活性位点内溶剂水分子与蛋白残基和配体之间形成了不同的氢键相互作用网络.

关键词

[MM/PBSA](#) [CDK2](#) [结合自由能](#) [溶剂水分子](#) [分子动力学](#)

分类号

DOI:

通讯作者:

杨胜勇 yangsy@scu.edu.cn

作者个人主页:

杨丽君^a;b 贾若^a 杨胜勇^{*,a}

扩展功能

本文信息

▶ [Supporting info](#)

▶ [PDF](#) (641KB)

▶ [\[HTML全文\]](#) (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 “](#)

[MM/PBSA” 的相关文章](#)

▶ 本文作者相关文章

· [杨丽君,贾若,杨胜勇](#)