

本期目录 | 下期目录 | 过刊浏览 | 高级检索

[打印本页] [关闭]

论文

金属核酸酶及寡聚酰胺与双链DNA分子对接模式的理论研究

朱艳艳, 苏延伟, 漆遥, 谭宏伟, 王艳, 陈光巨

北京师范大学化学学院, 北京 100875

摘要:

采用分子对接软件AutoDock分别研究了金属核酸酶、寡聚酰胺与DNA对接模式。研究表明, 金属核酸酶、寡聚酰胺与DNA对接结果与实验数据吻合得较好。在金属核酸酶与DNA的对接中, 最优构型都是金属核酸酶对接在DNA的小沟内。随着中心金属上电荷的增加, 最大对接能呈现上升趋势, 尤其是配体体积较小的金属核酸酶, 最佳对接位点受中心金属上电荷影响较大, 即随着中心金属上电荷的从少到多, 最佳对接位点呈现多样化的趋势。在柔性分子寡聚酰胺与双链DNA分子的对接中, 分子随DNA小沟的柔性变形是对接结合的关键。其最佳的结合物位点也都是在DNA的小沟内, 其对接结果与晶体结构一致。

关键词: 金属核酸酶 分子对接 寡聚酰胺 AutoDock程序

Molecular Docking Studies on the Metallonucleases and Polyamides with Double-strand DNA Molecules

ZHU Yan-Yan, SU Yan-Wei, QI Yao, TAN Hong-Wei, WANG Yan*, CHEN Guang-Ju*

College of Chemistry, Beijing Normal University, Beijing 100875, China

Abstract:

The studies on molecular docking of metallonucleases and polyamides with DNA were investigated via AutoDock program. Our studies demonstrate that the results of docking metal nucleases and polyamides with double-strand DNA are consistent with those of the experiments. The characteristics of the optimal conformations for the two copper nucleases with DNA are that the two copper nucleases are docked into the minor groove of DNA. With the increase of the charges at copper center, the biggest docked energies for the two copper nucleases increase gradually. For BPA ligand, the nuclease with the different charges on copper center is docked into the different sites in the minor groove. However, for IDB ligand, the nuclease is docked into the similar site in the minor groove even if the charges on the copper center are changed from 0.5 e to 2.0 e. The feature of the optimal conformations of the flexible molecule-polyamide with double-strand DNA is that the polyamides are also docked into the minor groove of DNA, which agrees with the experimental estimation.

Keywords: Metallonuclease Molecular docking Polyamide AutoDock program

收稿日期 2008-04-08 修回日期 网络版发布日期 2009-04-10

DOI:

基金项目:

国家重点“九七三”计划(批准号: G2004CB719900)和国家自然科学基金(批准号: 20673011, 20631020, 20503002和20771017)资助。

通讯作者: 王艳, E-mail:wangy@bnu.edu.cn; 陈光巨, E-mail:gjchen@bnu.edu.cn

作者简介:

参考文献:

1. Cohen J. D., Sadowski J. P., Dervan P. B.. J. Am. Chem. Soc. [J], 2008, 130: 402—403
2. Liu C., Wang M., Zhang T., *et al.*. Coord. Chem. Rev. [J], 2004, 248: 147—168
3. Thematic Issue on RNA/DNA Cleavage. Chem. Rev.

扩展功能

本文信息

Supporting info

PDF(311KB)

[HTML全文]

[\({article.html_WenJianDaXiao}KB\)](#)

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

文章反馈

浏览反馈信息

本文关键词相关文章

▶金属核酸酶

▶分子对接

▶寡聚酰胺

▶AutoDock程序

本文作者相关文章

PubMed

- [J], 1998, (3): 937—1262
4. Erkkila K. E., Odom D. T., Barton J. K.. Chem. Rev. [J], 1999, 99: 2777—2795
 5. Jiang Q., Xiao N., Shi P. F., *et al.*. Coord. Chem. Rev. [J], 2007, 251: 1951—1972
 6. Niklas N., Heinemann F. W., Hampel F., *et al.*. Inorg. Chem. [J], 2004, 43: 4663—4673
 7. Liu C. L., Zhou J. Y., Li Q. X., *et al.*. J. Inorg. Biochem. [J], 1999, 75: 233—240
 8. Trauger J. W., Baird E. E., Dervan P. B.. Nature [J], 1996, 382: 559—561
 9. Trauger J. W., Baird E. E., Mrksich M., *et al.*. J. Am. Chem. Soc. [J], 1996, 118: 6160—6166
 10. Gottesfeld J. M., Neely L., Trauger J. W., *et al.*. Nature [J], 1997, 387: 202—205
 11. ZHANG Yuan(张媛), LI Ze-Sheng(李泽生), SUN Miao(孙苗), *et al.*. Chem. J. Chinese Universities (高等学校化学学报) [J], 2005, 26(1): 102—105
 12. HE Yan-Ping(何严萍), HU Hai-Rong(胡海荣), XU Liao-Sa(许辽萨), *et al.*. Chem. J. Chinese Universities(高等学校化学学报) [J], 2005, 26(2): 254—258
 13. Becke A. D.. J. Chem. Phys. [J], 1993, 98: 5648—5652
 14. Lee C., Yang W., Parr R. G.. Phys. Rev. B [J], 1988, 37: 785—789
 15. Frisch M. J., Trucks G. W., Schlegel H. B., *et al.*. Gaussian 03 [CP], Pittsburgh PA: Gaussian Inc., 2004
 16. Morris G. M., Goodse D. S., Halliday R. S., *et al.*. J. Comput. Chem. [J], 1998, 19: 1639—1662
 17. Zhu Y. Y., Su Y. W., Li X. C., *et al.*. Chem. Phys. Lett. [J], 2008, 455: 354—360
 18. Li L., Murthy N. N., Telser J., *et al.*. Inorg. Chem. [J], 2006, 45: 7144—7159
 19. Tonmunphean S., Parasuk V., Kokpol S.. J. Mol. Model. [J], 2001, 7: 26—33

本刊中的类似文章

1. 许伟,蔡萍,严明,许琳,欧阳平凯. *Thermus thermophilus* 木糖异构酶与木糖醇的分子对接及模型分析[J]. 高等学校化学学报, 2007,28(5): 971-973
2. 郑喜亮; 张红星; 孙家锤. 双金属存在下整合酶和抑制剂5CITEP的分子对接研究[J]. 高等学校化学学报, 2006,27(7): 1298-1302
3. 肖勇军, 王建国, 刘幸海, 李永红, 李正名. 基于受体结构的AHAS抑制剂的设计、合成及生物活性[J]. 高等学校化学学报, 2007,28(7): 1280-
4. 胡建平,柯国涛,常珊,陈慰祖,王存新. 用分子对接方法研究HIV-1整合酶与病毒DNA的结合模式[J]. 高等学校化学学报, 2008,29(7): 1432-1437
5. 楚慧郢, 郑清川, 赵勇山, 张红星. 人类2-氨基3-羧基粘康酸6-半醛脱羧酶(ACMSD)与底物及抑制剂作用模型的理论研究 [J]. 高等学校化学学报, 2008,29(12): 2398-2402
6. 郑清川,吕绍武,赵勇山,牟颖,罗贵民,孙家锤. GSH对两种谷胱甘肽过氧化物酶模拟物活性影响的研究[J]. 高等学校化学学报, 2008,29(12): 2337-2340

文章评论

序号	时间	反馈人	邮箱	标题
				META http-e Type conter charset= Appreciatio star