

本期目录 | 下期目录 | 过刊浏览 | 高级检索

[打印本页] [关闭]

论文

拟南芥TIR1与生长素IAA相互作用的分子对接及分子动力学研究

王腾, 孙宏伟, 陈兰, 沈荣欣, 赖城明

南开大学化学学院, 天津 300071

摘要:

基于最新得到的拟南芥运输抑制剂响应蛋白1(TIR1)与吲哚乙酸(IAA)复合物的晶体结构, 使用分子对接方法和分子动力学方法对TIR1与生长素IAA相互作用的方式进行了研究. 分子对接结果表明, 通过逐级考察辅酶InsP₆和中心水分子的影响, 发现辅酶InsP₆和中心水分子对生长素IAA正确结合到活性位点有重要作用. 分子动力学结果表明, 复合物体系在整个模拟过程中较为稳定, 2个水分子相继作为中心水分子与生长素IAA形成了稳定的氢键作用, IAA与活性位点处残基的相互作用与晶体结构相比略有差异.

关键词: 拟南芥TIR1; 吲哚乙酸(IAA); 辅酶InsP₆; 分子对接; 分子动力学模拟

Docking and Molecular Dynamics Simulation Studies of Interaction Between Arabidopsis TIR1 and Auxin IAA

WANG Teng, SUN Hong-Wei*, CHEN Lan, SHEN Rong-Xin, LAI Cheng-Ming

Department of Chemistry, Nankai University, Tianjin 300071, China

Abstract:

On the basis of the complex crystal structure of transport inhibitor response 1(TIR1) and indole-3-acetic acid(IAA) obtained recently, systematic docking and molecular dynamics studies of interaction between auxin IAA and TIR1 have been performed using autodock 3.0 and NAMD 2.5 packages. The docking results indicate that the co-factor InsP₆ and central water molecule play important roles in binding to the TIR1 pocket for auxin IAA correctly. The complex of TIR1 and auxin IAA was stable during the MD simulation, and stable hydrogen bond interaction had been formed between two water molecules which acted as central water molecule one after the other with auxin IAA. The interaction between auxin IAA and active residues around binding site was a little different from that in crystal structure.

Keywords: Arabidopsis TIR1; Indole-3-acetic acid(IAA); InsP₆; Docking; Molecular dynamics simulation

收稿日期 2008-09-25 修回日期 网络版发布日期

DOI:

基金项目:

国家高技术研究发展专项经费(批准号: 2006AA10A213)和南开大学“南开之星”高性能计算项目资助.

通讯作者: 孙宏伟, 男, 博士, 教授, 主要从事分子模拟及结构化学研究. E-mail: sunhw@nankai.edu.cn

作者简介:

参考文献:

[1] Dharmasiri N., Dharmasiri S., Estelle M.. Nature [J], 2005, 435: 441—445

[2] Kepinski S., Leyser O.. Nature [J], 2005, 435: 446—451

[3] Tan X., Calderon-Villalobos L. A., Sharon M., et al.. Nature [J], 2007, 446: 640—645

扩展功能

本文信息

Supporting info

PDF(408KB)

[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

拟南芥TIR1; 吲哚乙酸(IAA); 辅酶InsP₆; 分子对接; 分子动力学模拟

本文作者相关文章

PubMed

[4]Guex N., Peitsch M. C..Electrophoresis

[J], 1997, 18: 2714—2723

[5]Sanner M. F.. J. Mol. Graphics

[J], 1999, 17: 57—61

[6]Morris G. M., Goodsell D. S., Halliday R., et al.. J. Comput. Chem.

[J], 1998, 19: 1639—1662

[7]LI Qiong(李琼), CHEN Pei-Quan(陈沛全), CHEN Lan(陈兰), et al.. Chem. J. Chinese Universities(高等学校化学学报)

[J], 2007, 28(8): 1552—1555

[8]Phillips J. C., Braun R., Wang W., et al.. J. Comput. Chem.

[J], 2005, 26: 1781—1802

[9]MacKerell Jr. A. D., Bashford D., Bellott M., et al.. J. Phys. Chem. B

[J], 1998, 102: 3586—3616

[10]CHEN Pei-Quan(陈沛全), SUN Hong-Wei(孙宏伟), CHEN Lan(陈兰), et al.. Chem. J. Chinese Universities(高等学校化学学报)

[J], 2004, 25(10): 1912—1915

[11]Humphrey W., Dalke A., Schulten K.. J. Mol. Graphics

[J], 1996, 14: 33—38

[12]Laaksonen L.. J. Mol. Graphics

[J], 1992, 10: 33—34

[13]Bergman D. L., Laaksonen L., Laaksonen A.. J. Mol. Graph. Model

[J], 1997, 15: 301—306

[14]Wallace A. C., Laskowski R. A., Thornton J. M.. Prot. Eng.

[J], 1995, 8: 127—134

本刊中的类似文章

文章评论

序号	时间	反馈人	邮箱	标题	内容
----	----	-----	----	----	----

1	2009-11-24				
---	------------	--	--	--	--

META http-equiv=Content-Type content="text/html" charset=unicode