

引用信息: ZHAO Yong-Shan, ZHENG Qing-Chuan, ZHANG Hong-Xing, CHU Hui-Ying, SUN Chia-Chung. Acta Phys. -Chim. Sin., 2009, 25(03): 417-422 [赵勇山 郑清川 张红星 楚慧郢 孙家钟. 物理化学学报, 2009, 25(03): 417-422]

本期目录 | 在线预览 | 过刊浏览 | 高级检索

[打印本页] [关闭]

人类丝氨酸消旋酶的同源模建及其与多肽类抑制剂的分子对接

赵勇山 郑清川 张红星 楚慧郢 孙家钟

吉林大学理论化学研究所, 理论化学计算国家重点实验室, 长春 130023

摘要:

利用同源模建和分子动力学模拟方法构建了人类丝氨酸消旋酶(hSR)的三维结构, 并利用profile-3D和procheck方法评估了模型的可靠性. 在此基础上用分子对接程序(affinity)将多肽类抑制剂A和B分别与hSR进行对接, 获得了其复合物结构的理论模型. 通过配体与受体之间相互作用能和结构分析给出了此类抑制剂与hSR的具体结合方式, 明确了hSR与此类抑制剂结合时起重要作用的氨基酸残基, 为基于人类丝氨酸消旋酶三维结构的药物设计提供重要的参考信息.

关键词: 人类丝氨酸消旋酶 分子动力学模拟 分子对接 同源模建

收稿日期 2008-11-04 修回日期 2008-12-11 网络版发布日期 2009-01-13

通讯作者: 郑清川 Email: zhengqch@jlu.edu.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(1174KB)

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

▶ 人类丝氨酸消旋酶

▶ 分子动力学模拟

▶ 分子对接

▶ 同源模建

本文作者相关文章

▶ 赵勇山

▶ 郑清川

▶ 张红星

▶ 楚慧郢

▶ 孙家钟