

DNA小沟结合二脒:水分子的识别作用

马国正; 求亚芳; 南俊民; 肖信

华南师范大学化学与环境学院, 广州 510006

摘要:

采用分子动力学模拟了DB921-DNA复合物, 通过7 ns的模拟研究表明: DB921一端的氨基氮原子与一个水分子形成氢键, 同时, 水分子又与DNA的5位A碱基的氮原子形成一个氢键. 水分子在DB921与DNA小沟结合中起了桥连的作用, 使得直线型的芳香二脒化合物DB921通过水桥与DNA小沟结合, 水分子诱导DB921分子与DNA的小沟域构型相适应, 与DNA小沟域的AATTC碱基有较强的结合作用. 在分子水平上提供了DB921与双螺旋DNA相互作用的结构及复合物的动态变化情况, 指出水分子在DNA小沟结合二脒化合物中的识别作用, 为设计出更高生物活性的DNA小沟结合剂提供一定的理论依据.

关键词: 小沟结合 二脒 水分子 分子识别

收稿日期 2008-06-09 修回日期 2008-07-10 网络版发布日期 2008-08-25

通讯作者: 马国正 Email: gzma@scnu.edu.cn

本刊中的类似文章

扩展功能

本文信息

[PDF\(528KB\)](#)

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

▶ [小沟结合](#)

▶ [二脒](#)

▶ [水分子](#)

▶ [分子识别](#)

本文作者相关文章

▶ [马国正](#)

▶ [求亚芳](#)

▶ [南俊民](#)

▶ [肖信](#)