

本期目录 | 下期目录 | 过刊浏览 | 高级检索

[打印本页] [关闭]

## 论文

### SARS冠状病毒3CL蛋白酶及其抑制剂的理论研究

王嵩,黄旭日,高雪峰,赵熹,孙家锺

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:

应用AutoDock程序将SARS冠状病毒3CL蛋白酶及其抑制剂配体和受体进行了对接,并用Insight II中的Discover 3模块进行了分子动力学模拟,分析了蛋白酶活性口袋的形状,讨论了其亚基的氢键、静电、疏水等相互作用,为进一步设计药物提供了重要的参考信息.

关键词: SARS冠状病毒3CL蛋白酶; 抑制剂; 对接; 分子动力学模拟

### Theoretical Studies on SARS Coronavirus 3CL Proteinase and Its Inhibitor

WANG Song,HUANG Xu-Ri\*,GAO Xue-Feng,ZHAO Xi,SUN Jia-Zhong

State Key Laboratory of Theoretical and Computational Chemistry,Institute of Theoretical Chemistry, Jilin University,Changchun 130023,China

#### Abstract:

As a positive stranded RNA virus,SARS virus's spread and replication are mainly determined by its inner six kinds of protein,including E protein,S protein,M protein,N protein,RNA polyprotein and proteinase.In the six ones,proteinase is closely related to the replication of the SARS virus,and so it is the best and the most important starting point when choosing medicine to kill virus. We docked ligand with receptor by means of Autodock program and simulated the molecular dynamic properties at SGI O3800 Operating Station through utilizing the Discover 3 modules of Insight II and analyzed the contour of proteinase pockets. Additiona-ly,we discussed interaction of subunits,hydrogen bonds,electronstatic and some hydrophobic effects,which provide an important reference for further studying the designing of medicine.

Keywords: SARS coronavirus 3CL proteinase; Inhibitor; Docking; Molecular dynamics simulation

收稿日期 2005-03-14 修回日期 网络版发布日期

DOI:

基金项目:

吉林省2003年科技发展计划基金(防治“非典”专项)(批准号: 0000297)资助.

通讯作者: 黄旭日(1962年出生),男,博士,教授,博士生导师,从事理论化学研究. E-mail: huangxr@jlu.edu.cn

作者简介:

参考文献:

本刊中的类似文章

文章评论

扩展功能

本文信息

Supporting info

PDF (334KB)

[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

SARS冠状病毒3CL蛋白酶; 抑制剂; 对接; 分子动力学模拟

本文作者相关文章

王嵩

黄旭日

高雪峰

赵熹

孙家锺

PubMed

Article by Wang, S.

Article by Huang, X. R.

Article by Gao, X. F.

Article by Diao, X.

Article by Sun, J. Z.

反馈人	<input type="text"/>	邮箱地址	<input type="text"/>
反馈标题	<input type="text"/>	验证码	<input type="text"/> 1346