

本期目录 | 下期目录 | 过刊浏览 | 高级检索

[打印本页] [关闭]

论文

分子动力学模拟研究不同类型材料表面对凝血因子XII九肽片段自然状态的影响

李波¹, 朱皓淼¹, 王颖¹, 赵波¹, 李利^{1,2}, 沈健^{1,2}

1. 南京师范大学, 江苏省生物功能材料重点实验室, 南京 210097;
2. 南京大学, 江苏省界面化学工程技术研究中心, 南京 210093

摘要:

用分子动力学软件NAMD在CHARMm力场下对凝血因子XII九肽片段及其与两性离子材料表面、亲水性和疏水性材料表面相互作用的水溶液模型进行5 ns分子动力学计算。均方根偏移、构象能、二面角能等结果显示, 两性离子材料表面和亲水性材料表面能够较好地维持凝血因子XII九肽片段的自然状态。

关键词: 蛋白质-表面相互作用; 分子动力学模拟; 凝血因子XII九肽片段; 两性离子; 构象

Molecular Dynamics Simulation of the Effect of Different Materials Surface on Natural Behavior of Nine Peptides of Coagulation Factor XII

LI Bo¹, ZHU Hao-Miao¹, WANG Ying¹, ZHAO Bo¹, LI Li^{1,2*}, SHEN Jian^{1,2*}

1. Nanjing Normal University, Jiangsu Key Laboratory of Biofunctional Materials, Nanjing 210097, China;
2. Nanjing University, Jiangsu Technological Research Center for Interfacial Chemistry and Chemical Engineering, Nanjing 210093, China

Abstract:

Using NAMD with CHARMm force field, molecular dynamics simulations over 5 ns were applied to four different systems—single nine peptides of coagulation Factor XII(FXII), nine peptides of FXII with hydrophobic, hydrophilic or zwitterionic material. According to the analysis of the RMSD, conformational energy and dihedral energy etc, the zwitterionic material and hydrophilic material are suitable for keeping the natural behavior of nine peptides of FXII.

Keywords: Protein-surface interaction; Molecular dynamics simulation; Nine peptides of FXII; Zwitterionic; Conformation

收稿日期 2009-07-28 修回日期 网络版发布日期

DOI:

基金项目:

国家自然科学基金(批准号: 20874047), 江苏省自然科学基金(批准号: BK2008434)的资助。

通讯作者: 沈健, 男, 教授, 博士生导师, 主要从事生物医用材料研究. E-mail: jshen@njnu.edu.cn; 李利, 男, 教授, 主要从事材料抗凝血机理研究. E-mail: lili3@njnu.edu.cn

作者简介:

参考文献:

- [1]ZHANG An-Xiong(张安兄), LÜ De-Long(吕德龙), ZHONG Wei(钟伟), et al.. Shanghai Journal of Biomedical Engineering(上海生物医学工程)[J], 2004, 25(3): 53—58
- [2]Montanaro L., Arciola C. R., Cenni E., et al.. Biomaterials[J], 2001, 22: 59—266
- [3]Zhu H. M., Li B., Li L., et al.. Science in China Series B: Chemistry[J], 2008, 51(1): 78—85
- [4]YAN Han(严菡), ZHU Hao-Miao(朱皓淼), SHENG Jian(沈健). Science in China(中国科学)[J], 2007, 37(3): 274—278
- [5]Sanchez J., Lundquist P. B., Elgue G.. Thrombosis Research[J], 2002, 105(5): 407—412
- [6]Citarella F., Misiti S., Felici A., et al.. Steroids[J], 1996, 61(4): 270—276
- [7]Schuettelkopf A. W., van Aalten D. M. F.. Acta Crystallographica[J], 2004, D60: 1355—1363
- [8]Phillips J. C., Braun R., Wang W.. Journal of Computational Chemistry[J], 2005, 26: 1781—1802

扩展功能

本文信息

Supporting info

PDF(642KB)

[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

蛋白质-表面相互作用; 分子动力学模拟; 凝血因子XII九肽片段; 两性离子; 构象

本文作者相关文章

PubMed

[9]van der Spoel D., Lindahl E., Hess B., et al.. Gromacs User Manual, Version 3.2[M], Groningen, The Netherlands: University of Groningen, 2004

[10]Humphrey W., Dalke A., Schulten K..Molec. Graphics[J], 1996, 14: 33—38

本刊中的类似文章

文章评论

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"/> 0501

Copyright 2008 by 高等学校化学学报