

北京大学新闻中心主办



首页 新闻纵横 专题热点 领导活动 教学科研 北大人物 媒体北大 德赛论坛 文艺园地 光影燕园 信息预告 联系我们

提交查询内

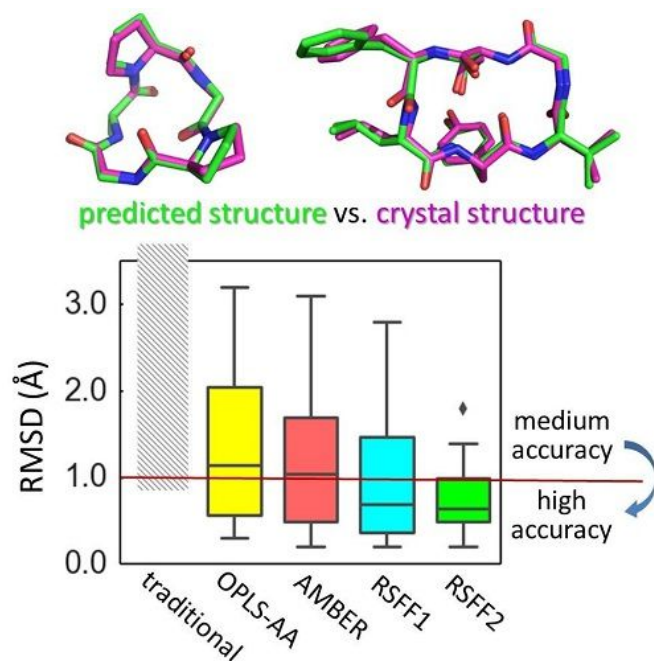
高级搜索

深圳研究生院吴云东院士课题组在环状多肽的结构预测上取得重要进展

日期: 2016-05-10 信息来源: 深圳研究生院

北京大学深圳研究生院吴云东院士课题组最近在 *J. Phys. Chem. Lett.* (《物理化学通讯》) 上发表了最新成果: 使用残基特异性力场进行环状多肽的准确结构预测及构象分析 ([Accurate Structure Prediction and Conformational Analysis of Cyclic Peptides with Residue-Specific Force Fields](#))。

多肽类药物介于小分子和蛋白质之间, 同时具有两者的一些优势, 近年来越来越受到广泛关注。与线性肽相比, 环状多肽有构象相对刚性、代谢稳定性好、易穿过生物膜等优势, 并且很多天然活性物质都是环状多肽。环状多肽的活性依赖于其三维结构, 如果能通过序列准确地 (接近实验精度) 预测其结构, 就可以为该领域的研究提供很大程度上的帮助。



该项工作使用吴云东课题组发展的RSFF2力场, 可以准确地预测出20个环肽中的17个, 与晶体结构的均方偏差 (RMSD) 小于1.1Å。新方法的准确度明显高于之前的方法。另外, 他们还发现相对于线性多肽, 环状多肽的构象取样与球蛋白更相似, 为环状多肽在药物设计中作为蛋白分子的替代物提供了理论上的支持。

该论文第一作者为深圳研究生院化学生物学与生物技术学院博士研究生耿浩, 蒋帆博士为共同通讯作者。

编辑: 江南

北京大学官方微博



北京大学新闻网



北京大学官方微信

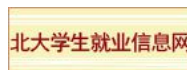


[\[打印页面\]](#) [\[关闭页面\]](#)

转载本网文章请注明出处

友情链接

合作伙伴



投稿邮箱: E-mail: xwcnzx@pku.edu.cn 新闻热线: 010-62756381

