



应用 *ab initio* 方法和 ABEEMon 模型研究含铝金属酶

杨忠志, 宁方达

(辽宁师范大学化学化工学院, 辽宁 大连 116029)

Study on Aluminum Metalloenzymes by *ab initio* Method and ABEEMon Model

YANG Zhong-Zhi, NING Fang-Da

(School of Chemistry and Chemical Engineering, Liaoning Normal University, Dalian 116029, Liaoning China)

- 摘要
- 参考文献
- 相关文章

全文: [PDF \(447 KB\)](#) [HTML \(1 KB\)](#) 输出: [BibTeX](#) | [EndNote \(RIS\)](#) [背景资料](#)

摘要 应用原子-键电负性均衡方法中的 σ 模型 (ABEEMon 模型), 通过大量量子化学计算, 拟合确定了含铝金属酶体系的 ABEEMon 参数. 将这些参数应用到含铝金属酶大分子体系的电荷分布及 Fukui 函数的计算, 结果显示, ABEEMon 模型计算得到的电荷分布及 Fukui 函数与从头算和实验结论均有很好的-一致性. 还进一步计算分析了 1L3R 酶与丝氨酸结合前后的分子各区域的电荷分布, 结果表明, Al^{3+} 是 1L3R 酶的活性中心, 根据结合后分子的 Fukui 函数可以得出丝氨酸会使 1L3R 酶的活性降低. 另外, 通过比较两者结合前后 Al^{3+} 的广义 Fukui 函数, 证明了广义 Fukui 函数可用于该体系分子间反应活性的比较, 同时也说明利用 ABEEMon 模型来预测含铝金属酶的抑制剂是可行的.

关键词: 从头算方法 ABEEMon σ 模型 电荷分布 Fukui 函数

Abstract: By applying the atom-bond electronegativity equalization on model (ABEEMon model), a large number of quantum chemistry calculations were performed to determine the ABEEMon parameters of aluminum metalloenzymes. Then these parameters were employed to study the charge distributions and Fukui function of aluminum metalloenzymes. Calculated results obtained by ABEEMon model are in good agreement with those by the *ab initio* method and experimental conclusions. Further analysis of the charge distributions between 1L3R and 1L3R-serine indicates that Al^{3+} is the active center of 1L3R, and serine would reduce the activity of 1L3R according to Fukui function. In addition, comparing the generalized Fukui function of Al^{3+} in 1L3R with that in 1L3R-serine, generalized Fukui function is proved to be appropriate in this system, and ABEEMon model is feasible to predict the inhibitors of aluminum metalloenzymes.

Key words: *ab initio* method; ABEEMon σ model; charge distributions; Fukui function

基金资助:

国家自然科学基金资助项目 (21133005)

作者简介: 杨忠志 (1940-), 男, 吉林舒兰人, 辽宁师范大学化学化工学院教授, 博士, 博士生导师, 主要从事理论与计算化学及其应用等研究.

引用本文:

杨忠志, 宁方达. 应用 *ab initio* 方法和 ABEEMon 模型研究含铝金属酶[J]. 吉首大学学报自然科学版, 2013, 34(5): 74-78.

YANG Zhong-Zhi, NING Fang-Da. Study on Aluminum Metalloenzymes by *ab initio* Method and ABEEMon Model[J]. Journal of Jishou University (Natural Sciences Edit, 2013, 34(5): 74-78.

服务

- ▶ 把本文推荐给朋友
- ▶ 加入我的书架
- ▶ 加入引用管理器
- ▶ E-mail Alert
- ▶ RSS

作者相关文章

- ▶ 杨忠志
- ▶ 宁方达

- [2] GEERLINGS P,PROFT F D,LANGENAEKER W.Conceptual Density Functional Theory [J].Chem. Rev., 2003, 103:1 793-1 873.
- [3] KANG Y K,SCHERAGA H A.An Efficient Method for Calculating Atomic Charges of Peptides and Proteins from Electronic Populations [J].J. Phys. Chem. B,2008,112:5 470-5 478.
- [4] REED A E,WEINSTOCK R B,WEINHOLD F.Natural Population Analysis [J].J. Chem. Phys.,1985,83:735-746.
- [5] WILSON M S,ICHIKAWA S.Comparison Between the Geometric and Harmonic Mean Electronegativity Equilibration Techniques [J].J. Phys. Chem.,1989,93:3 087-3 089.
- [6] DEROUANE E G,FRIPIAT J G,BALLMOOS R V.Quantum Mechanical Calculations on Molecular Sieves. 2. Model Cluster Investigation of Silicoaluminophosphates [J].J. Phys. Chem.,1990,94:1 687-1 692.
- [7] JAKALIAN A,BUSH B L,JACK D B,et al.Fast,Efficient Generation of High-Quality Atomic Charges.AM1-BCC Model: I .Method [J].J. Comput. Chem.,2000,21(2): 132-146.
- [8] K CK H,SANDMARK J,GIBSON K J,et al.Crystal Structure of Two Quaternary Complexes of Dethiobiotin Synthetase,Enzyme-MgADP-ALF3 - Diaminopelargonic Acid and Enzyme-MgADP-Dethiobiotin-Phosphate;Implications for Catalysis [J].Protein Science,1998,7:2 560-2 566.
- [9] MADHUSUDAN,AKAMINE P,XUONG N H,et al.Crystal Structure of a Transition State Mimic of the Catalytic Subunit of cAMP-Dependent Protein Kinase [J].Nature Structural Biology,2002,9(4):273-277.
- [10] SCHLICHTING I,REINSTEIN J.Structures of Active Conformations of UMP Kinase from Dictyostelium Discoideum Suggest Phosphoryl Transfer is Associative [J].Biochemistry,1997,36:9 290-9 296.
- [11] 杨忠志,徐珍珍.应用Fukui函数探讨双苯基-取代的自由基闭环反应的区位选择性 [J].辽宁师范大学学报:自然科学版,2012,35(2):193-196.

- [1] 肖岚普,刘红良. GM(1,1)模型和Verhulst模型的改进及其应用[J]. 吉首大学学报自然科学版, 2013, 34(5): 16-20.
- [2] 庄大春,王承松. 基于PSR模型的湘西州建设用地需求控制[J]. 吉首大学学报自然科学版, 2013, 34(4): 93-96.
- [3] 李勇智,王玲,黄河平. 基于多环控制的Buck-Boost型LED驱动系统设计[J]. 吉首大学学报自然科学版, 2013, 34(3): 39-44.
- [4] 谭红霞,李建男,黎略,王晶晶. 基于不同载重与车速的筒支梁桥动力响应[J]. 吉首大学学报自然科学版, 2013, 34(2): 87-90.
- [5] 刘风云,陈旭. 对偶风险模型中的随机观察[J]. 吉首大学学报自然科学版, 2013, 34(1): 16-20.
- [6] 朱启香. 马氏利率的离散时间风险模型的破产概率[J]. 吉首大学学报自然科学版, 2012, 33(5): 31-33.
- [7] 卢万银. 基于BP网络多指标多因素最优工艺参数分析[J]. 吉首大学学报自然科学版, 2012, 33(5): 34-38.
- [8] 刘景锋,李凌燕. 虚部光子晶体掺杂介质色散模型[J]. 吉首大学学报自然科学版, 2012, 33(5): 51-55.
- [9] 占绍文,辛武超. 基于钻石模型的西安市文化产业竞争力评价实证[J]. 吉首大学学报自然科学版, 2012, 33(5): 110-115.
- [10] 王沁,曹灿,刘曦,江松明. 成都市城乡收入差距与经济增长的VAR模型[J]. 吉首大学学报自然科学版, 2012, 33(4): 115-119.
- [11] 包振华,殷明娥,张绍华. 重尾索赔下带干扰复合Poisson-Geometric模型的破产概率[J]. 吉首大学学报自然科学版, 2012, 33(2): 16-18.
- [12] 尹亚红. 江西省高等教育与经济互动发展的实证分析[J]. 吉首大学学报自然科学版, 2012, 33(2): 111-116.
- [13] 曹灿,赵联文,昌春艳,刘娟. 2009年加拿大H1N1疫情的ARIMA模型预测与分析[J]. 吉首大学学报自然科学版, 2011, 32(4): 35-38.
- [14] 伊健,鄂云文. 耗散腔场中双光子Tavies-Cummings模型量子纠缠分析[J]. 吉首大学学报自然科学版, 2011, 32(4): 50-54.
- [15] 王敬勇. 基于Wild Bootstrap 非参数方法的AR模型线性检验[J]. 吉首大学学报自然科学版, 2011, 32(3): 22-25.