

研究论文

光谱法与分子模拟研究胡椒碱对牛血清白蛋白的键和作用

何文英*, a 陈光英b 杜娟c 姚晓军c

(a海南师范大学化学系 海口 571158)

(b海南省热带药用植物化学重点实验室 海口 571158)

(c兰州大学化学化工学院 兰州 730000)

收稿日期 2008-4-21 修回日期 2008-5-21 网络版发布日期 2008-11-17 接受日期 2008-7-7

摘要

利用荧光光谱法及紫外吸收光谱法结合计算机模拟技术研究了在模拟生理条件下胡椒碱(piperine)与牛血清白蛋白(Bovine Serum Albumin, BSA)的相互作用. 根据荧光猝灭的有关方程分别求得不同温度下(298, 308和318 K)药物与蛋白相互作用的结合常数、结合位点数及键合距离. 实验所得到的热力学参数($\Delta H^\ddagger = -9.55 \text{ kJ/mol}$, $\Delta S^\ddagger = 46.75 \text{ J}\cdot\text{mol}^{-1}\cdot\text{K}^{-1}$)表明维持药物与蛋白质的相互作用力主要是疏水作用和静电作用. 分子模拟的结果显示了胡椒碱与BSA的键合机理和键合模式, 表明维持药物与蛋白质的相互作用力主要是疏水作用和氢键(位于氨基酸残基His 242, Arg 222和Arg 218位). 此外, 基于胡椒碱的荧光猝灭效应, 首次探讨了药物-蛋白质体系的几种物理化学参数, 包括电荷密度(δ)、离解常数(Kd)及量子产率(F)的变化效应.

关键词 [胡椒碱](#) [牛血清白蛋白](#) [相互作用](#) [荧光光谱](#) [分子模拟](#)

分类号

DOI:

通讯作者:

何文英 hwylsl-0706@163.com

作者个人主页:

何文英*; a 陈光英b 杜娟c 姚晓军c

扩展功能

本文信息

▶ [Supporting info](#)

▶ [PDF](#) (437KB)

▶ [\[HTML全文\]](#) (0KB)

▶ [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](#)

相关信息

▶ [本刊中包含“胡椒碱”的相关文章](#)

▶ 本文作者相关文章

· [何文英, 陈光英, 杜娟, 姚晓军](#)