

分子动力学模拟方法研究结构水在糖原合成酶激酶-3 β 中的作用

孙浩 蒋勇军 俞庆森 邹建卫

浙江大学化学系, 杭州 310027; 浙江大学宁波理工学院分子设计与营养工程重点实验室, 浙江 宁波 315100

摘要:

用分子动力学模拟的方法揭示了结构水分子在糖原合成酶激酶-3 β (GSK-3 β)中的作用. 如果没有结构水, ATP嘌呤环的结合位置将发生偏移以填补结构水留下的空间; ATP结合口袋中的氢键网络将被破坏, 保守残基Lys85与ATP的磷酸根侧链只能形成一个保守氢键, 无法维持磷酸根转移所需的线性关系; 由于失去了氢键网络的稳定作用, Glu97和Lys85会向远离ATP的方向移动, 并导致Arg96的侧链发生偏转, 使Arg96无法保持与Arg180和Lys205之间正常的相对位置, 最终影响GSK-3 β 与底物的结合.

关键词: 糖原合成酶激酶-3 β 结构水分子 分子动力学模拟

收稿日期 2008-11-27 修回日期 2009-01-07 网络版发布日期 2009-02-11

通讯作者: 蒋勇军 Email: yjjiang@nit.zju.edu.cn

本刊中的类似文章

Copyright © 物理化学学报

扩展功能

本文信息

[PDF\(1934KB\)](#)

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

[▶ 糖原合成酶激酶-3 \$\beta\$](#)
[▶ 结构水分子](#)
[▶ 分子动力学模拟](#)

本文作者相关文章

[▶ 孙浩](#)
[▶ 蒋勇军](#)
[▶ 俞庆森](#)
[▶ 邹建卫](#)