

研究论文

诺氟沙星-DNA复合物的分子动力学模拟

马国正^{*1}, 蒋勇军², 俞庆森²

(¹华南师范大学化学与环境学院 广州 510006)

(²浙江大学宁波理工学院药物分子设计与营养工程重点实验室 宁波 315100)

收稿日期 2006-7-3 修回日期 2006-8-28 网络版发布日期 2007-2-14 接受日期 2006-10-23

摘要 采用分子建模的方法构建了诺氟沙星-DNA复合物的初始结构, 通过2 ns的分子动力学(MD)模拟研究表明:

诺氟沙星能够和双螺旋d[ATATCGATAT]₂形成稳定的复合物, 药物分子可紧密结合在DNA的小沟区域,

并且能够与DNA的鸟嘌呤碱基形成两个稳定的氢键.

在分子水平上提供了诺氟沙星直接与双螺旋DNA相互作用的结构及复合物的动态变化情况.

关键词 [诺氟沙星](#) [DNA](#) [分子建模](#) [分子动力学模拟](#)

分类号

Molecular Dynamics Simulation of the Norfloxacin-DNA Complex

MA Guo-Zheng^{*1}, JIANG Yong-Jun², YU Qing-Sen²

(¹ School of Chemistry & Environment, South China Normal University, Guangzhou 510006)

(² Key Laboratory for Molecular Design and Nutrition Engineering of Ningbo City, Ningbo Institute of Technology, Zhejiang University, Ningbo 315100)

Abstract Molecular dynamics (MD) simulations were used to investigate the interaction of norfloxacin with the DNA oligonucleotide d[ATATCGATAT]₂. The initial binding structure was built with molecular modeling based on the experimental results. A 2 ns MD calculation was performed to study the norfloxacin-DNA complex and the results indicated that norfloxacin was inserted in the minor groove of DNA, binding to the region of duplex TCGA bases. The possible H-bonds between carbonyl and carboxyl group of norfloxacin and amine group of the guanine base support a minor-groove complex for the compound in GC DNA sequence. Molecular dynamics studies complement the structural analysis and provide a clear picture of the norfloxacin-DNA complex.

Key words [norfloxacin](#) [DNA](#) [molecular modeling](#) [molecular dynamics simulation](#)

DOI:

通讯作者 马国正 gzma@scnu.edu.cn

扩展功能

本文信息

▶ [Supporting info](#)

▶ [PDF\(273KB\)](#)

▶ [\[HTML全文\]\(38KB\)](#)

▶ [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](#)

▶ [复制索引](#)

▶ [Email Alert](#)

▶ [文章反馈](#)

▶ [浏览反馈信息](#)

相关信息

▶ [本刊中 包含“诺氟沙星”的
相关文章](#)

▶ 本文作者相关文章

· [马国正](#)

·

· [蒋勇军](#)

·

· [俞庆森](#)