

微过氧化物酶水溶液的ABEEM/MM动力学模拟

崔宝秋; 宫利东; 赵东霞

辽宁师范大学化学化工学院, 辽宁 大连 116029; 锦州师范高等专科学校化学系, 辽宁 锦州 121000

摘要:

应用原子-键电负性均衡浮动电荷分子力场(ABEEM/MM), 对微过氧化物酶水溶液进行了分子动力学模拟. 研究了水溶液对微过氧化物酶的结构, 血红素的皱裂构象以及轴配体咪唑基的取向的影响. 结果表明, 在水溶液中微过氧化物酶的骨架氨基酸是稳定的, 而血红素的皱裂构象在水分子的作用下趋于平面. 与血红素轴配体咪唑基键连的组氨酸决定着咪唑基的空间取向, 而咪唑基与血红素侧链的丙酸基的静电作用对其取向仅起次要作用.

关键词: ABEEM/MM浮动电荷分子力场 微过氧化物酶 血红素 构象 分子动力学模拟

收稿日期 2007-12-04 修回日期 2008-03-14 网络版发布日期 2008-04-09

通讯作者: 宫利东 Email: gongjw@lnnu.edu.cn

本刊中的类似文章

扩展功能

本文信息

[PDF\(262KB\)](#)

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

▶ [ABEEM/MM浮动电荷分子力场](#)

▶ [微过氧化物酶](#)

▶ [血红素](#)

▶ [构象](#)

▶ [分子动力学模拟](#)

本文作者相关文章

▶ [崔宝秋](#)

▶ [宫利东](#)

▶ [赵东霞](#)