

研究论文

血红素近轴侧基氢键的ABEEM/MM分子动力学模拟

杨忠志; 崔宝秋

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ABEEM/MM浮动电荷力场对鲸鱼肌红蛋白及突变体进行了分子动力学模拟. 结果表明, 血红素近轴侧基不存在稳定的双氢键, 该氢键对轴配体咪唑的取向不起决定性作用, 而咪唑的取向与键联的组氨酸有密切联系. 同时表明, 血红素轴配体的柔性与其邻近的氨基酸和咪唑体积有关.

关键词: ABEEM/MM力场 动力学模拟 血红素 咪唑基 氢键

收稿日期 2007-04-24 修回日期 2007-05-22 网络版发布日期 2007-07-27

通讯作者: 杨忠志 Email: zzyang@lnnu.edu.cn

本刊中的类似文章

扩展功能

本文信息

PDF(273KB)

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力场

▶ 动力学模拟

▶ 血红素

▶ 咪唑基

▶ 氢键

本文作者相关文章

▶ 杨忠志

▶ 崔宝秋