

论文

ABEEM/MM浮动电荷力场应用于血红素结构的研究

崔宝秋<sup>1,2</sup>, 管清梅<sup>1</sup>, 宫利东<sup>1</sup>, 赵东霞<sup>1</sup>, 杨忠志<sup>1</sup>

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

摘要:

运用拟合的参数, 应用ABEEM/MM浮动电荷力场对血红素分子结构进行了模拟. 结果表明, 该力场与CHARMM力场相比, 能更好地模拟晶体结构. 计算的ruffling构象能与B3LYP/6-31G\*计算结果的线性相关系数在0.98以上, 同时表明血红素分子中twist-angle对ruffling构象具有明显影响. ABEEM/MM力场计算的细胞色素 $c_{552}$ 中血红素分子的电荷分布与CHARMM固定电荷力场的比较, 更准确地反映了血红素分子的电荷分布以及极化现象.

关键词: ABEEM/MM力场 血红素 几何结构 构象能 电荷分布

Studies on the Heme Prosthetic Group's Geometry by ABEEM/MM Method

CUI Bao-Qiu<sup>1,2</sup>, GUAN Qing-Mei<sup>1</sup>, GONG Li-Dong<sup>1</sup>, ZHAO Dong-Xia<sup>1</sup>, YANG Zhong-Zhi<sup>1\*</sup>

1. College of Chemistry and Chemical Engineering, Liaoning Normal University, Dalian 116029, China;
2. Department of Chemistry, Jinzhou Teacher College, Jinzhou 121000, China

Abstract:

Applying the developed parameters, the heme prosthetic group was simulated by the ABEEM/MM method. The results show that these simulations can reproduce better X-ray structures than CHARMM method. The distorted ruffling conformational energies obtained from the ABEEM/MM method agree well with those by B3LYP/6-31G\* method. The linear correlation coefficient  $R$  is over 0.98. The investigations show that the twist-angles have important effects on the ruffling conformational energies. The accurate charge for Cytochrome  $c_{552}$  from ABEEM/MM method can be used to investigate better the polarization effects than those from CHARMM method.

Keywords: ABEEM/MM method Heme Geometry Conformational energy Charge distribution

收稿日期 2007-02-09 修回日期 1900-01-01 网络版发布日期

DOI:

基金项目:

扩展功能

本文信息

Supporting info

PDF(338KB)

[HTML全文](OKB)

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

文章反馈

浏览反馈信息

本文关键词相关文章

▶ ABEEM/MM力场

▶ 血红素

▶ 几何结构

▶ 构象能

▶ 电荷分布

本文作者相关文章

▶ 崔宝秋

▶ 管清梅

▶ 宫利东

▶ 赵东霞

▶ 杨忠志

▶ 崔宝秋

▶ 管清梅

▶ 宫利东

▶ 赵东霞

▶ 杨忠志

PubMed

Article by

Article by

Article by

Article by

Article by

Article by

Article by

Article by

Article by

Article by

参考文献:

1. Jentzen W., Ma J. G., Shelnutt J. A.. Biophysical J.[J], 1998, 74: 753—763
2. Mackerell A. D. Jr., Bashford D., Bellott R. L., *et al.* J. Chem. Phys.B[J], 1998, 102: 3586—3616
3. Munro O. Q., Bradley J. C., Hancock R. D., *et al.* J. Am. Chem. Soc.[J], 1992, 114: 7218—7230
4. Shelnutt J. A.. J. Porphyrins Phthalocyanines[J], 2000, 4: 386—389
5. Autenrieth F., Tajkhorshid E., Baudry J., *et al.* J. Comput. Chem.[J], 2004, 25: 1613—1622
6. Oda A., Yamaotsu N., Hirono S.. J. Comput. Chem.[J], 2005, 26: 818—826
7. WANG Chang-Sheng(王长生), SUN Ren-An(孙仁安), YANG Zhong-Zhi(杨忠志). Chem. J. Chinese Universities(高等学校化学学报)[J], 1997, 18(8): 1353—1355
8. Yang Z. Z., Wang C. S.. J. Phys. Chem. A[J], 1997, 101: 6315—6321
9. Wang C. S., Yang Z. Z.. J. Chem. Phys.[J], 1999, 110: 6189—6197
10. Cong Y., Yang Z. Z.. Chem. Phys. Lett.[J], 2000, 316: 324—329
11. YANG Zhong-Zhi(杨忠志), CONG Yao(丛尧), WANG Chang-Sheng(王长生). Chem. J. Chinese Universities(高等学校化学学报)[J], 1999, 20(11): 1781—1783
12. YANG Zhong-Zhi(杨忠志), XIAO Hong-Yan(肖红艳). Chem. J. Chinese Universities(高等学校化学学报)[J], 2005, 26(11): 1886—1889
13. Yang Z. Z., Wu Y., Zhao D. X.. J. Chem. Phys.[J], 2004, 120: 2541—2557
14. Wu Y., Yang Z. Z.. J. Phys. Chem. A[J], 2004, 108: 7563—7576
15. Li X., Yang Z. Z.. J. Chem. Phys.[J], 2005, 122: 084514
16. Yang Z. Z., Li X.. J. Chem. Phys.[J], 2005, 123: 094507
17. Yang Z. Z., Li X.. J. Phys. Chem. A[J], 2005, 109: 3517—3520
18. Li X., Yang Z. Z.. J. Phys. Chem. A[J], 2005, 109: 4102—4111
19. Zhang Q., Yang Z. Z.. Chem. Phys. Lett.[J], 2005, 403: 242—247
20. Yang Z. Z., Zhang Q.. J. Comput. Chem.[J], 2006, 27: 1—10
21. Yang Z. Z., Qian P.. J. Chem. Phys.[J], 2006, 125: 064311
22. ZHANG Qiang(张强), YANG Zhong-Zhi(杨忠志). Chem. J. Chinese Universities(高等学校化学学报)[J], 2005, 26(12): 2345—2347
23. Northrup S. H., Pear R. P., Morgan J. D., *et al.* J. Mol. Biol.[J], 1981, 153: 1087—1109
24. Prabhu N. V., Dalosto S. D., Sharp K. A., *et al.* J. Phys. Chem. B[J], 2002, 106: 5561—5571
25. Bret C., Roth M., N rager S., *et al.* Biophy. J.[J], 2002, 83: 3049—3065
26. Prabhu N. V., Zhu P., Sharp K. A.. J. Comput. Chem.[J], 2004, 25: 2049—2064
27. Scharnagl C., Reif M., Friedrich J.. Biophy. J.[J], 2005, 89: 64—75
28. Harrenga A., Reincke B., Rterjans H., *et al.* J. Mol. Biol.[J], 2000, 295: 667—678

本刊中的类似文章

1. 李思殿, 任光明, 苗常青, 李栋东 .含有平面六配位碳的第二及第三过渡系金属夹心配合物密度泛函理论研究[J]. 高等学校化学学报, 2007,28(1): 129-131
2. 薛冰纯, 蔡文生, 邵学广.有限长Y型碳纳米管结构和性质的第一性原理研究[J]. 高等学校化学学报, 2008,29(12): 2407-2412
3. 叶社房, 钟李明, 吴艺晖, 张其清 .多壁碳纳米管诱导A549细胞氧化应激与去极化线粒体膜电位[J]. 高等学校化学学报, 2009,30(3): 497-501

文章评论

序号	时间	反馈人	邮箱	标题	内容
1	2009-	review@unc	edfwen@163.com	sdwelle	Buy discount ugg cheap ugg shoes ugg ugg rainier boots ugg usa discount boots ugg 5825 shoes sale ugg su