

论文

GSH对两种谷胱甘肽过氧化物酶模拟物活性影响的研究

郑清川¹, 吕绍武², 赵勇山¹, 牟颖², 罗贵民², 孙家锺¹

1. 吉林大学理论化学研究所, 理论化学计算国家重点实验室,
2. 分子酶学工程教育部重点实验室, 长春 130023

摘要:

设计并合成了谷胱甘肽过氧化物酶(GPX)模拟物6A,6A'-二苯胺-6B,6B'-二硒桥联-β-环糊精(6-AnSeCD)。采用双酶偶联法测定GPX的活力结果显示, 6A,6A'-二环己胺-6B,6B'-二硒桥联-β-环糊精(6-CySeCD)催化谷胱甘肽还原H₂O₂和枯烯H₂O₂的活力均比6-AnSeCD的高。为了进一步考察6-CySeCD和6-AnSeCD与GSH之间的相互作用, 进行了分子动力学(MD)模拟和分子对接研究。结果表明, 与GSH的结合使GPX模拟物的构象发生变化, 这种改变可能是影响桥连GPX模拟物催化活性的关键因素。

关键词: 谷胱甘肽过氧化物酶 模拟物 分子动力学模拟 分子对接

Effects of GSH on the Activity of Two Glutathione Peroxidase Mimics

ZHENG Qing-Chuan¹, LÜ Shao-Wu², ZHAO Yong-Shan¹, MU Ying², LUO Gui-Min², SUN Chia-Chung^{1*}

1. State Key Laboratory of Theoretical and Computational Chemistry, Institute of Theoretical Chemistry, Changchun 130023, China;
2. Key Laboratory for Molecular Enzymology and Engineering of the Ministry of Education, Jilin University, Changchun 130021, China

Abstract:

6A,6A'-dianilino-6B,6B'-diselenide-bis-β-cyclodextrin(6-AnSeCD) was designed and synthesized to imitate the antioxidant enzyme glutathione peroxidase(GPX). The GPX activities of 6-AnSeCD and 6A,6A'-dicyclohexylamine-6B,6B'-diselenide-bis-β-cyclodextrin(6-CySeCD) were assessed in classical coupled reductase assay. 6-CySeCD exhibits better GPX activity than 6-AnSeCD in the reduction of H₂O₂ and cumenyl hydroperoxide by glutathione, respectively. And then, with the molecular dynamics (MD) simulations, the interaction between GPX mimics(6-CySeCD and 6-AnySeCD) and GSH were investigated. The MD results show great differences in the conformation and bond lengths between the each GPX mimics and the its substrate-enzyme complex, which demonstrate the possibility that such change might be the key factor for the bridge GPX mimics' catalysis.

Keywords: Glutathione peroxidase Mimic Molecular dynamics simulation Docking

收稿日期 2008-09-19 修回日期 1900-01-01 网络版发布日期

扩展功能

本文信息

Supporting info

PDF(289KB)

[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

▶ 谷胱甘肽过氧化物酶

▶ 模拟物

▶ 分子动力学模拟

▶ 分子对接

本文作者相关文章

▶ 郑清川

▶ 吕绍武

▶ 赵勇山

▶ 牟颖

▶ 罗贵民

▶ 孙家锺

▶ 郑清川

▶ 吕绍武

▶ 赵勇山

▶ 牟颖

▶ 罗贵民

▶ 孙家锺

PubMed

Article by

Article by

Article by

Article by

Article by

Article by

Article by

Article by

Article by

Article by

Article by

DOI:

基金项目:

通讯作者: 孙家锺

作者简介:

参考文献:

1. Flohé L. Curr. Top. Cell. Regul.[J], 1985, 27: 473—478
2. Reich H. J., Jasperse C. P. J. Am. Chem. Soc.[J], 1987, 109: 5549—5555
3. Ganther H. E., Kraus R. J. Methods. Enzymol.[J], 1984, 107: 593—602
4. Mugesh G., du Mont W. W., Sies H. Chem. Rev.[J], 2001, 101: 2125—2180
5. Luo G., Ren X., Liu J., *et al.* Curr. Med. Chem.[J], 2003, 10: 1151—1183
6. Liu J., Gao S., Luo G., *et al.* Biochem. Biophys. Res. Commun.[J], 1998, 247: 397—400
7. Ren X., Xue Y., Zhang K., *et al.* FEBS. Lett.[J], 2001, 507: 377—380
8. Dong Z., Huang X., Mao S., *et al.* Chemistry[J], 2006, 12: 3575—3579
9. Lv S., Wang X., Mu Y., *et al.* FEBS. J.[J], 2007, 274: 3846—3854
10. ZHENG Xi-Liang(郑喜亮), ZHANG Hong-Xing(张红星), SUN Chia-Chung(孙家锺), *et al.* Chem. J. Chinese Universities(高等学校化学学报)[J], 2006, 27(7): 1298—1302
11. Iwao T., Yasuhisa K., Tadashi M. J. Am. Chem. Soc.[J], 1986, 108: 4514—4518
12. Klayman D. L., Griffin T. S. J. Am. Chem. Soc.[J], 1973, 95: 197—199
13. Wilson S. R., Zucker P. A., Huang R. R. C., *et al.* J. Am. Chem. Soc.[J], 1989, 111: 5936—5939
14. Insight II User Guide[CP], San Diego: Molecular Simulation Inc., 2000
15. Betzel C., Saenger C., Hingerty B. E., *et al.* J. Am. Chem. Soc.[J], 1984, 106: 7545—7557
16. Jorgensen W. L., Chandrasekhar J., Madura J. D., *et al.* J. Chem. Phys.[J], 1983, 79: 926—935
17. Affinity User Guide[CP], San Diego: MSI, 1999

本刊中的类似文章

1. 许伟,蔡萍,严明,许琳,欧阳平凯. *Thermus thermophilus* 木糖异构酶与木糖醇的分子对接及模型分析[J]. 高等学校化学学报, 2007,28(5): 971-973
2. 李小森. 用分子动力学模拟水合物储氢[J]. 高等学校化学学报, 2007,28(3): 552-555
3. 陈沛全,孙宏伟,李正名,王建国,马翼,赖城明. 单噻磺隆晶体-活性构象转换的分子动力学模拟[J]. 高等学校化学学报, 2007,28(2): 278-282
4. 周艳霞,张勇,谭宏伟,贾宗超,陈光巨. 苏氨酸在昆虫抗冻蛋白抗冻活性中的作用[J]. 高等学校化学学报, 2007,28(3): 526-529
5. 石剑,张敏华,董秀芹. 超临界CO₂中甲醇和乙醇无限稀释扩散系数的分子动力学模拟与实验测定[J]. 高等学校化学学报, 2007,28(3): 518-521
6. 陈佳,张博珣,安洋,洪水声,姜广志,冯德日,房向阳,刘兰英. 以透明质酸为骨架的新型谷胱甘肽过氧化物酶(GPX)模拟酶的制备及性质研究[J]. 高等学校化学学报, 2006,27(11): 2110-2113
7. 赵莉,杨华,李卓,李泽生,孙家锺. 聚苯乙烯在石墨表面吸附的分子动力学模拟[J]. 高等学校化学学报, 2006,27(7): 1340-1342
8. 郑喜亮,张红星,孙家锺. 双金属存在下整合酶和抑制剂5CITEP的分子对接研究[J]. 高等学校化学学报, 2006,27(7): 1298-1302
9. 肖勇军,王建国,刘幸海,李永红,李正名. 基于受体结构的AHAS抑制剂的设计、合成及生物活性[J]. 高等学校化学学报, 2007,28(7): 1280-
10. 齐岩峰,高雪峰,黄旭日.

促红细胞生成素(EPO)受体(EBP)激活剂的理论突变设计

[J]. 高等学校化学学报, 2008,29(3): 615-617

11. 聂福德,刘建,李金山,赵晓平,李越生,范仲勇. VDF-CTFE共聚物在TATB表面吸附链构象的分子动力学模拟[J]. 高等学校化学学报, 2008,29(3): 605-610
12. 霍锐,石毅,魏景艳,徐俊杰,吕绍武,闫飞,苏家明,段玉晶,王诗雯,丛登立,李唯,闫岗林,罗贵民. 具有谷胱甘肽过氧化物酶活性的含硒人源单链抗体的制备[J]. 高等学校化学学报, 2008,29(7): 1379-1383
13. 胡建平,柯国涛,常珊,陈慰祖,王存新. 用分子对接方法研究HIV-1整合酶与病毒DNA的结合模式[J]. 高等学校化学学报, 2008,29(7): 1432-1437
14. 牟丹,吕中元,黄旭日,孙家锺. 聚乙烯在羟基化 β -石英(100)表面上的有序吸附[J]. 高等学校化学学报, 2008,29(10): 2065-2069
15. 楚慧郢,郑清川,赵勇山,张红星. 人类2-氨基-3-羧基粘康酸6-半醛脱羧酶(ACMSD)与底物及抑制剂作用模型的理论研究

[J]. 高等学校化学学报, 2008,29(12): 2398-2402

16. 徐俊杰,王诗雯,赵虹,陈桂秋,霍锐,田莉,段玉晶,李敏杰,杨柏,魏景艳. 量子点与人源抗谷胱甘肽单链抗体的连接

与表征[J]. 高等学校化学学报, 2009,30(3): 506-509

17. 朱艳艳, 苏延伟, 漆遥, 谭宏伟, 王艳, 陈光巨. 金属核酸酶及寡聚酰胺与双链DNA分子对接模式的理论研究[J]. 高等学校化学学报, 2009,30(4): 781-785

文章评论

序号	时间	反馈人	邮箱	标题	内容
					ugg online ugg bc online buy ugg boot boots sale ugg boc cardy ugg boots l cardy tall ugg ugg boots ugg knightsk