

论文

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

楚慧郢, 郑清川, 赵勇山, 张红星

吉林大学理论化学研究所, 理论化学计算国家重点实验室, 长春 130023

摘要:

利用同源模建和分子动力学模拟方法构建了人类2-氨基3-羧基粘康酸6-半醛脱羧酶(hACMSD)的三维结构, 并利用Profile-3D和Procheck等方法评估了模型的可靠性. 在此基础上, 用分子对接程序(Affinity), 将其底物2-氨基3-羧基粘康酸6-半醛(ACMS)和抑制剂喹啉酸(QA)分别与hACMSD进行对接, 获得了复合物结构的理论模型. 通过配体与受体之间相互作用能和结构分析给出了底物和抑制剂的具体结合方式, 明确了hACMSD与底物和抑制剂结合时起重要作用的氨基酸残基.

关键词: 2-氨基3-羧基粘康酸6-半醛脱羧酶 分子动力学模拟 分子对接 同源模建

Theoretical Studies on Interaction Mode Between Human 2-Amino 3-Carboxymuconate 6-Semialdehyde Decarboxylase and Substrate and Inhibitor

CHU Hui-Ying, ZHENG Qing-Chuan, ZHAO Yong-Shan, ZHANG Hong-Xing*

State Key Laboratory of Theoretical and Computational Chemistry, Institute of Theoretical Chemistry, Jilin University, Jilin University, Changchun 130023, China

Abstract:

The three dimensional structure of human 2-amino 3-carboxymuconate 6-semialdehyde Decarboxylase (hACMSD) was modeled and refined with homology modeling and molecular dynamics. And then, this model was assessed by Profile-3D and Procheck, which confirmed the refined model was reliable. The complex structures of the substrate or inhibitor with hACMSD were obtained and investigated through ligand-receptor docking studies by means of Affinity. The binding pattern predicted by the Affinity module reveals some important residues interacted with substrate or inhibitor, and provides a further refinement of the hACMSD/ inhibitor binding interaction as a basis for new structure-based design efforts.

Keywords: 2-Amino 3-carboxymuconate 6-semialdehyde Decarboxylase(ACMSD) Molecular dynamics simulation Docking Homology modeling

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

DOI:

基金项目:

通讯作者: 张红星

作者简介:

扩展功能

本文信息

Supporting info

PDF(405KB)

[HTML全文](0KB)

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

▶ 2-氨基3-羧基粘康酸6-半醛脱羧酶

▶ 分子动力学模拟

▶ 分子对接

▶ 同源模建

本文作者相关文章

▶ 楚慧郢

▶ 郑清川

▶ 赵勇山

▶ 张红星

▶ 楚慧郢

▶ 郑清川

▶ 赵勇山

▶ 张红星

PubMed

Article by

Article by

Article by

Article by

Article by

Article by

Article by

Article by

参考文献:

- Kurnasov O., Goral V., Colabroy K., et al.. Chem. Biol.[J], 2003, 10: 1195—1204
Magni G., Amici A., Emanuelli M., et al.. Adv. Enzymol. Relat. Areas Mol. Biol.[J], 1999, 73: 135—182
Hasegawa Y., Muraki T., Tokuyaya T., et al.. FEMS Microbiol. Lett.[J], 1992, 296: 33—36
Muraki T., Taki M., Hasegawa Y., et al.. Appl. Environ. Microbiol.[J], 2003, 69: 1564—1572
Colabroy K. L., Begley T. P.. J. Am. Chem. Soc.[J], 2005, 127: 840—841
Nishizuka Y., Ichiyama A., Hayaishi O.. Methods Enzymol.[J], 1970, 17: 471—476
Wilson R., Henderson L.. J. Bacteriol.[J], 1962, 85: 221—228
Ichiyama A., Nakamura S., Kawai H., et al.. J. Biol. Chem.[J], 1965, 240: 740—749
Martynowski D., Eyobo Y., Li T.F., et al.. Biochem.[J], 2006, 45: 10412—10421
Pucci L., Perozzi S., Cimadamore F., et al.. FEBS J.[J], 2007, 274: 827—840
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
Insight II User Guide[CP], San Diego: Accelrys Inc., 2000
Morris A. L., MacArthur M. W., Hutchinson E. G., et al.. Proteins[J], 1992, 12: 345—364

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. 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
7. 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
8. 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-
9. 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
10. 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
 11. 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
 12. 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
 13. 郑清川,吕绍武,赵勇山,牟颖,罗贵民,孙家锺. GSH对两种谷胱甘肽过氧化物酶模拟物活性影响的研究[J]. 高等学校化学学报, 2008,29(12): 2337-2340
 14. 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 boots online buy ugg boots boot sale ugg boots cardy ugg boots l cardy tall ugg ugg boots ugg knightsb