

HIV-1病毒DNA与整合酶结合后的构象变化

胡建平; 柯国涛; 常珊; 陈慰祖; 王存新

北京工业大学生命科学与生物工程学院, 北京 100022; 乐山师范学院化学与生命科学系, 四川 乐山 614004

摘要:

用分子动力学(MD)模拟方法优化了HIV-1病毒DNA与整合酶(IN)二聚体(IN₂)复合物模型结构,并分析了HIV-1病毒DNA结合IN₂后的构象变化.结果表明,按照HIV-1病毒DNA与IN₂结合能力的强度,病毒DNA可分为五个区域:非结合区、强结合区1、弱结合区、强结合区2和反应区,并用结合自由能计算验证了该分区的合理性.与未结合IN₂的病毒DNA相比,复合物模型中病毒DNA除了非结合区碱基外,其它四个区域的碱基构象变化较大.复合物模型中病毒DNA主链较大程度地偏离标准B型DNA以及结合部位的小沟变宽都是识别IN的结构基础.模拟结果与实验数据吻合较好,为基于HIV-1 IN的药物分子设计提供了一定的结构信息.

关键词: 病毒DNA 整合酶 分子动力学模拟 自由能计算 构象变化

收稿日期 2008-04-01 修回日期 2008-06-06 网络版发布日期 2008-09-15

通讯作者: 王存新 Email: cxwang@bjut.edu.cn

本刊中的类似文章

扩展功能

本文信息

[PDF\(2408KB\)](#)

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

▶ [病毒DNA](#)

▶ [整合酶](#)

▶ [分子动力学模拟](#)

▶ [自由能计算](#)

▶ [构象变化](#)

本文作者相关文章

▶ [胡建平](#)

▶ [柯国涛](#)

▶ [常珊](#)

▶ [陈慰祖](#)

▶ [王存新](#)