

研究论文

电喷雾质谱研究天然产物小分子识别人类端粒G-四链体及复合物的热稳定性

何湘伟, 龙海涛, 袁谷, 徐筱杰, 周亚伟

北京大学化学与分子工程学院化学生物学系, 北京分子科学国家实验室, 生物有机与分子工程教育部重点实验室, 北京 100871; 北京大学化学与分子工程学院, 北京 100871; 北京大学世佳研究中心, 北京 100084

摘要:

利用电喷雾质谱(ESI-MS)研究了12种天然产物小分子与人类端粒G-四链体结构的非共价相互作用和识别功能, 比较了不同小分子与人类端粒G-四链体的结合强弱, 发现了一种新的识别小分子——防己诺林碱对人类端粒G-四链体有很好的结合. 通过质谱升温实验比较了小分子结合对G-四链体热稳定性的影响, 防己诺林碱的结合使G-四链体的离子的解离温度($T_{1/2}$)上升到200 °C. 利用分子模拟对G-四链体DNA与小分子结合的模式以及稳定性进行了探讨, 给出了防己诺林碱可能的结合位点和结合模式, Autodock计算出来的结合能约为-31.5 kJ·mol⁻¹. 同原来的平面型分子不同, 防己诺林碱是一类新型结构的分子, 为设计合成新型G-四链体识别分子提供了新的结构模型.

关键词: 分子模拟 端粒 G-四链体DNA 天然产物小分子 电喷雾质谱

收稿日期 2009-11-03 修回日期 2010-01-12 网络版发布日期 2010-02-24

通讯作者: 袁谷 Email: guyuan@pku.edu.cn

本刊中的类似文章

1. 吴雄武;时钧. 流体熵相关性质的Monte Carlo模拟新方法[J]. 物理化学学报, 1993,9(06): 740-745
2. 刘洁翔;董梅;秦张峰;王建国. AIPO₄-5分子筛中二氯苯吸附的分子模拟[J]. 物理化学学报, 2004,20(07): 696-700
3. 庄文昌;陈晓;杨春杰;王庐岩;柴永存. 小角X射线散射表征AOT/水层状溶致液晶的有序性[J]. 物理化学学报, 2005,21(09): 1055-1058
4. 杨兵;张海全;许海;郑岩;于景生;马於光;沈家骢. 间位聚苯及其衍生物的构象与电子结构的理论研究[J]. 物理化学学报, 2004,20(12): 1476-1480
5. 郭向丹;黄世萍;滕加伟;谢在库. 水在Na_nZSM-5型分子筛中吸附的研究: 分子模拟[J]. 物理化学学报, 2006,22(03): 270-274
6. 王丽娟 刘够生 宋兴福 于建国. 十二烷基吗啉选择性吸附氯化钠的分子模拟[J]. 物理化学学报, 2009,25(05): 963-969
7. 施介华, 肖科科, 吕园园. α -氯丙酸乙酯对映体与 β -环糊精的主客体相互作用[J]. 物理化学学报, 2009,25(07): 1273-1278
8. 陶长贵, 冯海军, 周健, 吕玲红, 陆小华. 氧气在聚丙烯内吸附和扩散的分子模拟[J]. 物理化学学报, 2009,25(07): 1373-1378
9. 邵庆 吕玲红 陆小华 魏明杰 朱育丹 沈文枫. 纳米受限下溶质水化结构的分子模拟[J]. 物理化学学报, 2009,25(03): 583-589
10. 李晓锋;赵立峰;孙淮. GEMC和GDI方法计算流体气液相平衡的比较[J]. 物理化学学报, 2008,24(10): 1824-1830
11. 陈玉平;吕玲红;邵庆;黄亮亮;陆小华. 烷烃在丝光沸石型分子筛中吸附和扩散行为[J]. 物理化学学报, 2007,23(06): 905-910
12. 周健;汪文川. Gibbs系综Monte Carlo模拟甲烷的吸附平衡[J]. 物理化学学报, 2001,17(08): 723-727
13. 周健;朱宇;汪文川;陆小华;王延儒;时钧. 超临界NaCl水溶液的分子动力学模拟 [J]. 物理化学学报, 2002,18(03): 207-212
14. 周健;陆小华;王延儒;时钧. 超临界水的分子动力学模拟[J]. 物理化学学报, 1999,15(11): 1017-1022
15. 石磊;张小岗;张喜丰;杨冠英;韩布兴;闫海科. 混合超临界流体的密度及分子间相互作用[J]. 物理化学学报, 2000,16(01): 31-35
16. 曾勇平;居沈贵;邢卫红;陈长林. 分子模拟噻吩、苯、正己烷混合物在MFI和MOR中的吸附行为[J]. 物理化学学报, 2007,23(03): 343-348
17. 刘永明;李桂芝;宋万坤;王进军. 盐酸拓扑替康与人血清白蛋白的相互作用及分子模拟[J]. 物理化学学报,

扩展功能

本文信息

PDF(832KB)

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

▶ 分子模拟

▶ 端粒

▶ G-四链体DNA

▶ 天然产物小分子

▶ 电喷雾质谱

本文作者相关文章

▶ 何湘伟

▶ 龙海涛

▶ 袁谷

▶ 徐筱杰

▶ 周亚伟

2006,22(12): 1456-1459

18. 王伟彬, 银建中, 孙丽华, 冯恩民. CO₂/离子液体体系热力学性质的分子动力学模拟[J]. 物理化学学报, 2009,25(11): 2291-2295

Copyright © 物理化学学报