

研究论文

神经介素B受体与拮抗剂、激动剂的分子模拟研究

金 莲<sup>a</sup> 刘 鑫<sup>a</sup> 王 锐<sup>a,b</sup> 董守良<sup>\*,a</sup>

(<sup>a</sup>兰州大学 生命科学学院生物化学与分子生物学研究所 兰州 730000)

(<sup>b</sup>兰州大学 功能有机分子化学国家重点实验室 兰州 730000)

收稿日期 2008-3-18 修回日期 2008-5-17 网络版发布日期 2008-11-5 接受日期 2008-6-20

摘要

大鼠神经介素B受体(rat neuromedin B receptor, rNMBR)属于G蛋白偶联受体(G-protein coupled receptor, GPCR) A家族的成员. GPCR的结构特征和在信号传导中的重要作用决定了其可以作为很好的药物靶标. 关于rNMBR与内源性激动剂神经介素B (neuromedin B, NMB)以及与非肽类拮抗剂pd168368作用机制的研究对于合理设计受体药物分子有重要的指导意义. 在这一研究中, 我们使用同源模建, 构建受体的三维结构, 进行分子对接和分子动力学的计算. 基于受体三维结构, 通过10 ns的空载受体、激动剂-受体、拮抗剂-受体的分子动力学模拟, 探讨受体与激动剂与拮抗剂的作用机制. 研究表明rNMB-R中跨膜(transmembrane, TM)螺旋3, 5, 6, 7参与配体的结合. NMB与受体的结合, 使受体转变为活性构象, 而受体同拮抗剂pd168368恰好相反.

关键词

[神经介素B受体](#) [G-蛋白偶联受体](#) [同源模建](#) [分子动力学模拟](#) [分子对接](#)

分类号

DOI:

通讯作者:

董守良 [dongsl@lzu.edu.cn](mailto:dongsl@lzu.edu.cn)

作者个人主页:

金 莲<sup>a</sup> 刘 鑫<sup>a</sup> 王 锐<sup>a,b</sup> 董守良<sup>\*,a</sup>

扩展功能

本文信息

▶ [Supporting info](#)

▶ [PDF](#) (590KB)

▶ [\[HTML全文\]](#) (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](#)

相关信息

▶ [本刊中 包含 “](#)

[神经介素B受体” 的相关文章](#)

▶ [本文作者相关文章](#)