

研究论文

FKBP12蛋白与其抑制剂结合的分子动力学模拟和结合自由能计算

扈国栋 张少龙* 张庆刚

(山东师范大学物理与电子科学学院 济南 250014)

收稿日期 2008-4-30 修回日期 2008-11-24 网络版发布日期 2009-7-22 接受日期 2009-1-13

摘要

FKBP12 (FK506-binding protein-12)是一种具有神经保护和促神经再生作用的蛋白. 采用分子动力学模拟取样, 运用MM-GBSA方法计算了FKBP12和3个抑制剂(GPI-1046, 308和107)的绝对结合自由能, GPI-1046的结合能最小, 308小于107的结合能. 通过能量分解的方法考察了FKBP12蛋白的主要残基与抑制剂之间的相互作用和识别, 计算结果表明: 3个抑制剂具有相似的结合模式, Ile56和Tyr82主要表现为氢键作用, Tyr26, Phe46, Val55, Ile56, Trp59, Tyr82, Tyr87和Phe99形成疏水作用区. 计算结果和实验结果吻合.

关键词

[分子动力学](#) [MM-GBSA](#) [结合自由能](#) [FKBP12](#) [抑制剂](#)

分类号

DOI:

通讯作者:

张少龙 slzhan@sdu.edu.cn

作者个人主页:

扈国栋 张少龙* 张庆刚

扩展功能

本文信息

- ▶ [Supporting info](#)
- ▶ [PDF](#) (430KB)
- ▶ [\[HTML全文\]](#) (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 “](#)

[分子动力学” 的相关文章](#)

▶ 本文作者相关文章

· [扈国栋,张少龙,张庆刚](#)