

引用信息: Yu Yong-Hui; Li Chun-Hua; Lu Ben-Zhuo; Chen Wei-Zu; Wang Cun-Xin. Acta Phys. -Chim. Sin., 2003, 19(08): 757-761 [于永辉; 李春华; 卢本卓; 陈慰祖; 王存新. 物理化学学报, 2003, 19(08): 757-761]

本期目录 | 在线预览 | 过刊浏览 | 高级检索

[打印本页] [关闭]

从对接结构中挑选近天然构象的新方法

于永辉; 李春华; 卢本卓; 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

摘要:

分析了包含静电能(ΔE_{ele})、去水化自由能(ΔG_{ACE})以及范德华能(ΔE_{vdw})的打分函数在蛋白质-蛋白质对接中评价近天然构象的能力. 对17种蛋白质复合物对接体系进行打分的结果表明, 包含范德华能的打分函数($\Delta E_{ele} + \Delta G_{ACE} + \Delta E_{vdw}$)比通常的打分函数(ΔE_{ele} 、 ΔG_{ACE} 、 $\Delta E_{ele} + \Delta G_{ACE}$ 、 $\Delta E_{ele} + \Delta E_{vdw}$ 、 $\Delta G_{ACE} + \Delta E_{vdw}$)具有更好的区分近天然构象的能力. 进一步的研究表明, 优化(EM)对接体系后再进行打分, 上面几种打分函数对接结构的评价效果都有不同程度的改善, 其中打分函数($\Delta E_{ele} + \Delta G_{ACE} + \Delta E_{vdw}$)有更明显的改善. 为了进一步确定候选结构中的近天然构象, 以一种蛋白质复合物为例, 对候选结构进行分子动力学(MD)模拟, 根据MD轨迹中构象相对于初始构象的平方平均偏差(MSD)随时间的变化来辅助打分函数排除错误构象, 得到了较好的结果.

关键词: 打分函数 范德华能 能量优化(EM) 分子动力学(MD)模拟 近天然构象

收稿日期 2003-01-29 修回日期 2003-04-11 网络版发布日期 2003-08-15

通讯作者: 王存新 Email: cxwang@bjut.edu.cn

本刊中的类似文章

1. 沈龙珠; 李春华; 马晓慧; 常珊; 陈慰祖; 王存新. 针对蛋白质复合物Other类型的打分函数*[J]. 物理化学学报, 2006, 22(05): 622-626
2. 刘滔, 孙茂堂, 董晓武, 任欣, 杨欣, 杜立林, 胡永洲. 基于结构的新型CDK7抑制剂的设计、合成及其抗肿瘤活性[J]. 物理化学学报, 2009, 25(10): 2107-2112

Copyright © 物理化学学报

扩展功能

本文信息

PDF(1346KB)

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

▶ 打分函数

▶ 范德华能

▶ 能量优化(EM)

▶ 分子动力学(MD)模拟

▶ 近天然构象

本文作者相关文章

▶ 于永辉

▶ 李春华

▶ 卢本卓

▶ 陈慰祖

▶ 王存新