

论著

## 梭曼单链抗体酶EP<sub>6</sub>作用机理的计算机模拟

胡远东, 郑志兵, 王字玲, 焦克芳, 荣康泰, 李松

(北京毒物药物研究所, 北京 100850)

收稿日期 2000-4-21 修回日期 网络版发布日期 2009-2-23 接受日期 2000-11-6

摘要 在梭曼抗体酶EP<sub>6</sub>可变区(EP<sub>6</sub>V)三维结构的基础上利用自动柔性分子对接方法获得了P<sub>R</sub>C<sub>R</sub>-梭曼与EP<sub>6</sub>V复合物的结构, 结构分析和相互作用能计算结果表明, 氢键和静电作用在EP<sub>6</sub>V和P<sub>R</sub>C<sub>R</sub>-梭曼结合中起关键作用, 抗体酶重链Asn 52和轻链Tyr 95在水解过程中起了关键作用, 在生理条件下水分子在水解过程中也将起重要作用。

关键词 [梭曼](#) [抗体酶](#) [蛋白质结构, 三级](#) [水解作用](#) [计算机模拟](#)

分类号 [R966](#)

## Computer modeling on the abzyme catalyzing soman hydrolysis

HU Yuan-Dong, ZHENG Zhi-Bing, WANG Zi-Ling, JIAO Ke-Fang, RONG Kang-Tai, LI Song

(*Beijing Institute of Pharmacology and Toxicology, Beijing 100850, China*)

### Abstract

The P<sub>R</sub>C<sub>R</sub>-soman was docked into the active sites of variable region of abzyme EP<sub>6</sub>(EP<sub>6</sub>V) using the automated flexible docking procedure(Affinity), the complex structure of soman EP<sub>6</sub>V and the in teraction energy between soman and EP<sub>6</sub>V show H-bond and electrostatic interaction are important. The residues of the heavy chain Asn 52 and light chain Tyr 95 play a key role in the process of the soman hydrolysis, and water molecule is also important in this process under the physiologic conditions.

**Key words** [soman](#) [antibodies](#) [catalytic](#) [protein structure](#) [tertiary](#) [hydrolysis](#) [computer modeling](#)

DOI:

通讯作者

### 扩展功能

#### 本文信息

▶ [Supporting info](#)

▶ [PDF\(168KB\)](#)

▶ [\[HTML全文\]\(0KB\)](#)

▶ [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](#)

▶ [复制索引](#)

▶ [Email Alert](#)

▶ [文章反馈](#)

▶ [浏览反馈信息](#)

#### 相关信息

▶ [本刊中 包含“梭曼”的 相关文章](#)

▶ 本文作者相关文章

- [胡远东](#)
- [郑志兵](#)
- [王字玲](#)
- [焦克芳](#)
- [荣康泰](#)
- [李松](#)