

论文

多巴胺D2受体三维结构预测及与激动剂配体相互作用的研究

朱七庆;郭宗儒

中国医学科学院中国协和医科大学药物研究所,北京100050

摘要:

以细菌视紫红质(bacteriorhodopsin)的三维晶体结构为模板,预测了多巴胺D2受体跨膜区的7个α螺旋肽段的三维结构。根据定点突变实验数据以及预测的受体三维结构,确定了激动剂配体结合腔由Asp86,Ser141,Ser144等12个氨基酸残基组成。为了校正和检验所得的模型,分别以一组刚性、一组柔性的激动剂与受体对接(DOCK),分析-logIC<sub>50</sub>和结合能Eb相关性,较好的结果说明该模型是可靠的。

关键词: 多巴胺D2受体 三维结构预测 对接

STUDY ON THE 3D-STRUCTURE PREDICTION OF DOPAMINE D2 RECEPTOR AND ITS INTERACTION WITH AGONISTS

Zhu Qiqing and Guo Zongru

Abstract:

A model of dopamine D2 receptor transmembrane helices was constructed using the bacteriorhodopsin X-ray coordinates as a template. Based on the information from site directed mutagenesis, the binding pocket, including nine amino acid residues besides indispensable Asp 86, Ser 141 and Ser 144 residues, was defined. In order to rectify the 3D-structure of dopamine D2 receptor and test the binding sites of the receptor agonists, two sets of dopamine D2 receptor agonists (one is rigid, the other is flexible) were selected for docking. A result of good correlation between-logIC<sub>50</sub> and binding energy E<sub>b</sub> indicated that the predicted model is reliable for the investigation of the receptor ligand interaction and design of new active molecules.

Keywords: 3D-Structure prediction DOCK Dopamine D2 receptor

收稿日期 1997-02-03 修回日期 网络版发布日期

DOI:

基金项目:

通讯作者: 郭宗儒

作者简介:

参考文献:

本刊中的类似文章

文章评论 (请注意:本站实行文责自负, 请不要发表与学术无关的内容!评论内容不代表本站观点.)

扩展功能

本文信息

- Supporting info
- PDF (719KB)
- [HTML全文]
- 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
- 文章反馈
- 浏览反馈信息

本文关键词相关文章

- 多巴胺D2受体
- 三维结构预测
- 对接

本文作者相关文章

- 朱七庆
- 郭宗儒

PubMed

- Article by
- Article by

反馈人	<input type="text"/>	邮箱地址	<input type="text"/>
反馈标题	<input type="text"/>	验证码	<input type="text" value="7779"/>

