

论文

基于受体结构的药物分子设计系统:维甲类分子与其结合蛋白之间相互作用的研究

迟翰林;郭宗儒;杨光中;褚风鸣;胡文贵;吴文英

中国医学科学院,中国协和医科大学药物研究所

摘要:

大分子解剖程序,配体分子契合适配和DOCK程序,以及计算化学的其它程序等,已集成为基于受体结构和分子间相互作用的进行分子设计的软件系统,定名为BIOS(Biomolecularinteractionsandorientationsimulator)。BIOS软件可在普通的微机上运行。使用BIOS分别剥离了细胞浆维甲结合蛋白(CRBP)和副睾维甲酸结合蛋白(E-RABP)两种蛋白的配体结合腔,剥离是围绕配体以同样的分子距离进行的。从而得到了芳香性残基分布相似的两个结合腔,其结合位点的几何排布却有相当差别。揭示出的结合腔已用于一系列的维甲类化合物的DOCK研究。E-RABP的结合腔可做设计新维甲类分子的模板。

关键词: 分子图形学 DOCK 维甲类

A MOLECULAR DESIGN SYSTEM BASED ON RECEPTOR STRUCTURES:STUDY ON THE INTERACTIONS BETWEEN RETINOIDS AND THEIR BINDING PROTEINS

HL Chi;ZR Guo;GZ Yang;FM Chu;WG Hu and WY Wu

Abstract:

The macromolecule anatomy ,ligand-fitting ,docking and other computational chemistry programs have been integrated into BIOS(biomolecular interactions and orientation simulator), to be used on IBM compatible microcomputers as a tool for drug design based on receptor structure and molecular interactiOns. Using the BIOS system ,the cellular serum retinol-binding protein(CRBP) and the epididymal retinoic acid binding protein (E-RABP) were scooped around the ligands in the same intermolecular distance to leave two cavities,which show a similarity in distributions of the aromatic residues. However,the geometry of the two binding sites was quite different.The unraveled binding sites were docked by a serics of retinoids,E-RABP binding site may serve as a template for design of new retinoids.

Keywords: Molecular modeling, DOCK, Retinoids

收稿日期 1995-01-26 修回日期 网络版发布日期

DOI:

基金项目:

通讯作者:

作者简介:

参考文献:

本刊中的类似文章

- 1. 雷小平;张亮仁;刘波.6-取代氨基-1,2-双(对氯苯)-己烯-1 类化合物的设计、合成及钙调素拮抗活性的研究[J].药学报, 1997,32(6): 426-430

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(311KB)
- [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

- 分子图形学
- DOCK
- 维甲类

本文作者相关文章

- 迟翰林
- 郭宗儒
- 杨光中
- 褚风鸣
- 胡文贵
- 吴文英

PubMed

- Article by
- Article by
- Article by
- Article by
- 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="1578"/>