

[本期目录] [下期目录] [过刊浏览] [高级检索]

[打印本页] [关闭]

论文

基于中药数据库的HIV抑制剂的筛选

高维娜;李云;张瑞;高慧;徐为人;李爱秀;杜奇石;张欣;魏冬青

1. 天津师范大学 生物信息与药物开发研究所, 天津 300074; 2. 天津药物研究院, 天津 300193; 3. 武警医学院, 天津 300162

摘要:

目的用现代化学信息学手段和中药化学数据库寻找新的抗HIV药物。方法利用现有的抗HIV的药物作模版,进行中药分子数据库搜索,然后采用分子对接方法得到HIV-1蛋白酶受体与亚叶酸的合理复合物结构,用分子动力学方法对对接结果分别进行无水存在200 ps和有水存在50 ps的模拟。结果根据数据库搜索和对接,认为亚叶酸可以作为药物开发的起点。通过分析分子动力学数据,可以了解配体各个区域与受体相互作用的细节和变化规律。结论本工作得到的HIV-1蛋白酶与中药分子抑制剂的结合模式信息将有助于设计和改造出效果更好的抗HIV-1蛋白酶抑制剂。

关键词: 蛋白酶抑制剂 中药分子数据库搜索 分子对接 分子动力学 亚叶酸

Screening of new HIV inhibitors based on the database of traditional Chinese medicine

GAO Wei-na; LI Yun; ZHANG Rui; GAO Hui; XU Wei-ren; LI Ai-xiu; DU Qi-shi; ZHANG Xin; WEI Dong-qing

Abstract:

AimTo report the preliminary result of the HIV inhibitor screening based on cheminformatics tools and the traditional Chinese medicine database. MethodsDatabase search was carried out with saquinavir molecule as a template, further screening was made with docking. Detailed studies using molecular dynamics simulation of 50 ps and 200 ps were made with respect to a potential leading compound, leucovorin. ResultsThe leucovorin molecule distinguished from other molecules as a potential drug candidate and is subject to extensive studies. The bonding profile and energy were calculated with MD simulations. ConclusionOur results could be very helpful when we modify leucovorin or design new inhibitors against HIV.

Keywords: traditional Chinese medicines database search docking molecular dynamics leucovorin HIV protease

收稿日期 2005-06-08 修回日期 网络版发布日期

DOI:

基金项目:

通讯作者: 魏冬青

作者简介:

扩展功能

本文信息

► Supporting info

► PDF(165KB)

► [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

► 蛋白酶抑制剂

► 中药分子数据库搜索

► 分子对接

► 分子动力学

► 亚叶酸

本文作者相关文章

► 高维娜

► 李云

► 张瑞

► 高慧

► 徐为人

► 李爱秀

► 杜奇石

► 张欣

► 魏冬青

PubMed

► Article by

参考文献：

本刊中的类似文章

1. 高琦;王琳;赵知中.非肽类HIV蛋白酶抑制剂的研究进展[J].药学学报, 1999,34(8): 635-640
2. 毛立民;于世凤;孙升华.金属蛋白酶抑制剂BB-94抑制Lewis肺癌生长和转移的实验研究[J].药学学报, 2000,35(6): 473-475
3. 张建军;;石瑞丽.Caspases在缺氧性脑微血管内皮细胞凋亡中的作用[J].药学学报, 2003,38(10): 739-742
4. 杨勤刚;何煦昌;白东鲁.HIV蛋白酶抑制剂研究进展[J].药学学报, 2005,40(5): 389-394
5. 蒋少红 马旭东 黄铁群 许云禄 郑瑞玑.异硫氰酸苯乙酯诱导Molt-4细胞p15基因去甲基化及机制研究[J].药学学报, 2009,44(4): 350-354

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.)

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"/> 6874