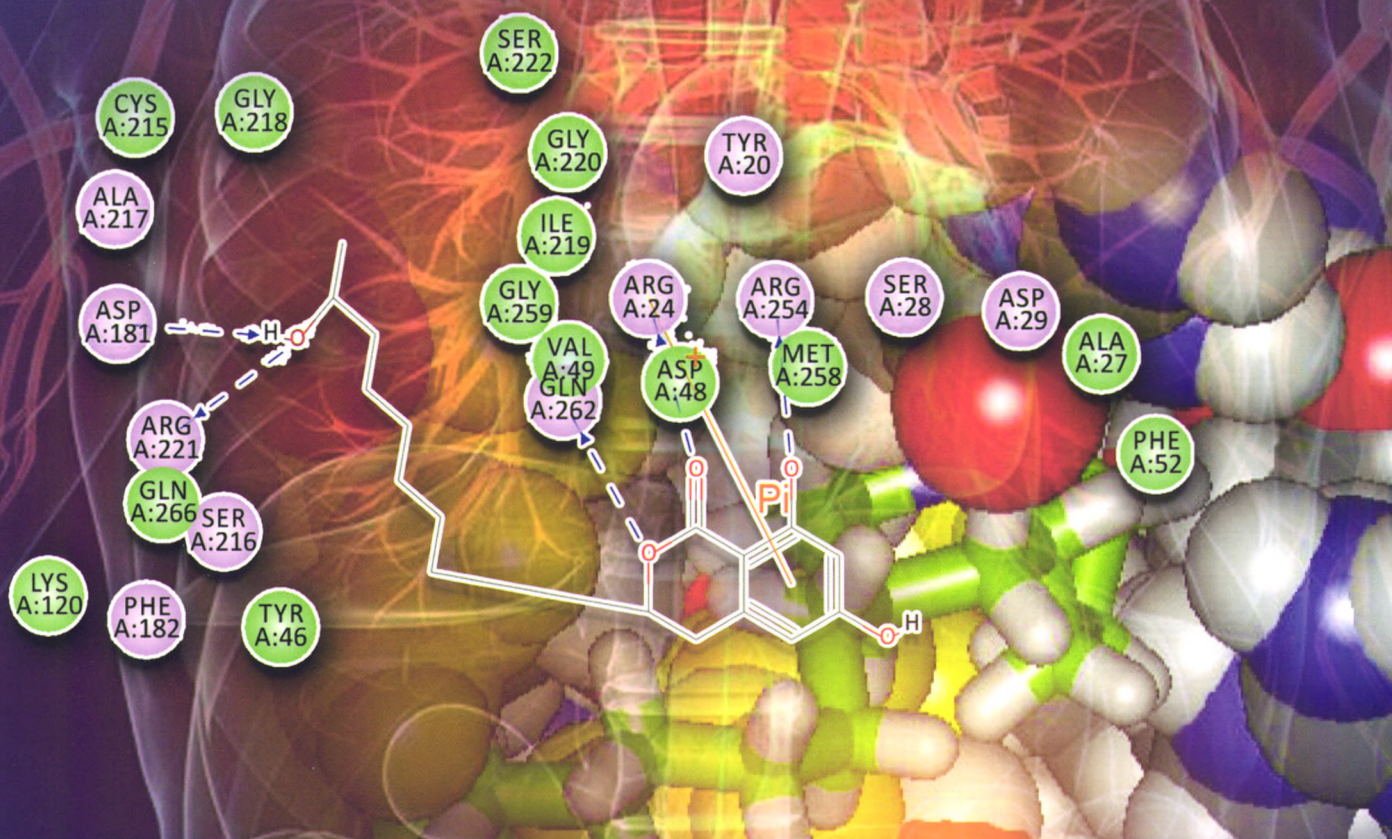


生物化学与生物物理进展

PROGRESS IN BIOCHEMISTRY AND BIOPHYSICS



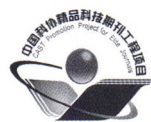
- PTP1B抑制剂
- 分子对接方法
- 烷基异香豆素类衍生物



中国科学院生物物理研究所 主办
中国生物物理学会



科学出版社 出版
Science Press



综述与专论

膜蛋白的表达：在无细胞体系中实现功能性表达、折叠和组装

..... 李剑勇 满亚辉 陈倩 裴迪 吴文健 (389)

老化和精神疾病引起的皮层抑制功能变化

..... 陈为迎 李胜光 张弢 (401)

情绪调节时间知觉的作用方式及认知神经机制

..... 崔倩 赵科 傅小兰 (409)

低强度聚焦超声对中枢神经调控作用研究进展

..... 杨雪宁 杨佳佳 万柏坤 明东 (422)

研究报告

神经元对于高频电刺激的动态响应

..... 黄璐 封洲燕 王兆祥 (432)

基于天然产物的蛋白酪氨酸磷酸酶 1B 抑制剂的虚拟筛选

..... 张倩 甘强 刘霞 陈曦 冯长根 (442)

技术与方法

基于间隔二肽组分和递归特征消除法的DNA 结合蛋白的鉴定

..... 汤亚东 刘潇 刘太岗 谢鹭 陈兰明 (453)

前沿透视

细胞休眠在肿瘤耐药和复发中的作用

..... 代亚非 向娟娟 (460)

Letter to Editor

人源核小体组装蛋白 1 类似蛋白 5(NAP1L5)促进 293T 细胞增殖

..... 李敏 张海涛 李总红 侯俊杰 徐小兰 (471)

其他

• 《生物化学与生物物理进展》征稿简则 (475)

封面说明 蛋白酪氨酸磷酸酶 1B (PTP1B) 是治疗 II 型糖尿病的新型靶点之一, 筛选天然产物来源的 PTP1B 抑制剂有助于开发糖尿病治疗新药. 本文构建了含有 42 296 个小分子的天然产物库, 以 PTP1B 蛋白为靶标, 采用基于分子对接的虚拟筛选方法并结合 ADMET 性质预测, 从所构建的天然产物库中筛选出类药性良好的三个化合物, 包括对苯醌类化合物 7、烷基异香豆素类衍生物 10 和 Clavepictine 类似物 11, 其中化合物 10 和 11 的 PTP1B 抑制活性未见报道. 结合方式分析表明, 化合物 7 和 11 主要通过氢键与 PTP1B 结合, 占据其第一位点; 化合物 10 通过 5 个氢键、1 个 π - σ 键、疏水作用、范德华力和静电相互作用与 PTP1B 结合, 既占据第一位点又占据第二位点, 还与 WPD 环和连接处结合, 推测有较强的抑制活性和选择性. 体外抑制实验证明, 化合物 10 对 PTP1B 的 IC_{50} 为 $(74.58 \pm 1.23) \mu\text{mol/L}$, 抑制活性良好.

(张倩, 甘强, 刘霞, 陈曦, 冯长根. 基于天然产物的蛋白酪氨酸磷酸酶 1B 抑制剂的虚拟筛选, 本期第 442~452 页)

Reviews and Monographs

Membrane protein expression: functional expression, folding and assembly within cell free system

LI Jian-Yong, MAN Ya-Hui, CHEN Qian, PEI Di, WU Wen-Jian 389

Cortical inhibition related to aging and mental disorders

CHEN Wei-Ying, LI Sheng-Guang, ZHANG Tao 401

The mode of action and cognitive neural mechanisms in emotional modulation of interval timing

CUI Qian, ZHAO Ke, FU Xiao-Lan 409

The progress of low intensity focused ultrasound on the regulation of central nervous system

YANG Xue-Ning, YANG Jia-Jia, WAN Bai-Kun, MING Dong 422

Research Papers

Dynamic responses of neurons to high frequency stimulation

HUANG Lu, FENG Zhou-Yan, WANG Zhao-Xiang 432

Virtual screening of protein tyrosine phosphatase 1B inhibitors based on natural products

ZHANG Qian, GAN Qiang, LIU Xia, CHEN Xi, FENG Chang-Gen 442

Techniques and Methods

Identification of DNA-binding proteins using gapped-dipeptide

composition and recursive feature elimination algorithm

TANG Ya-Dong, LIU Xiao, LIU Tai-Gang, XIE Lu, CHEN Lan-Ming 453

Perspectives

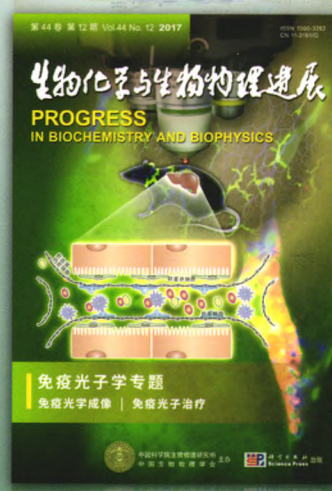
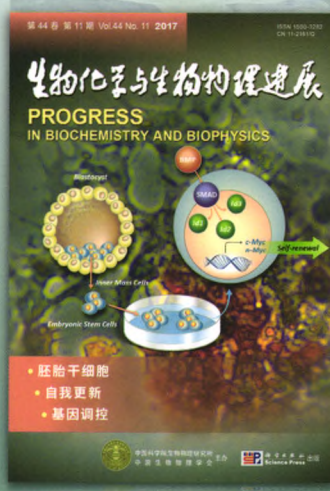
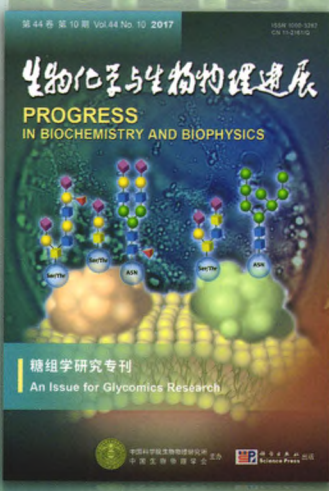
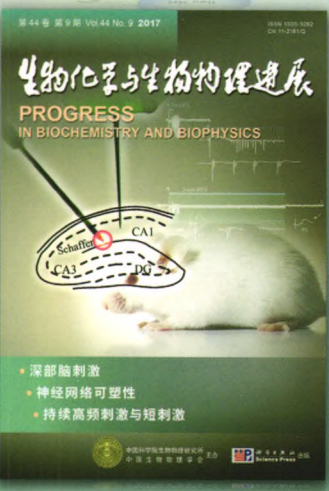
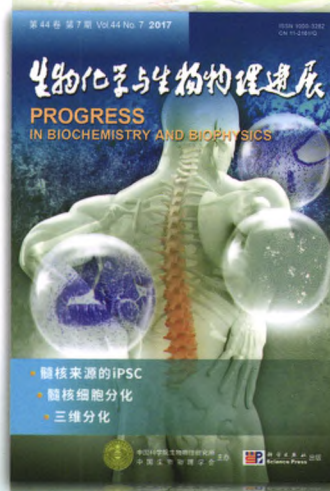
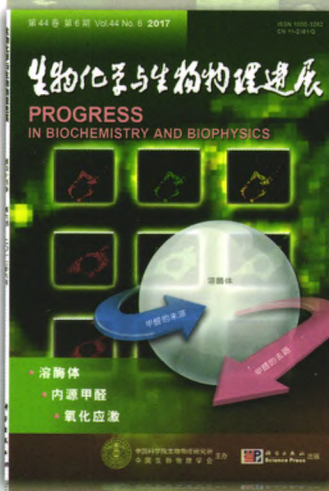
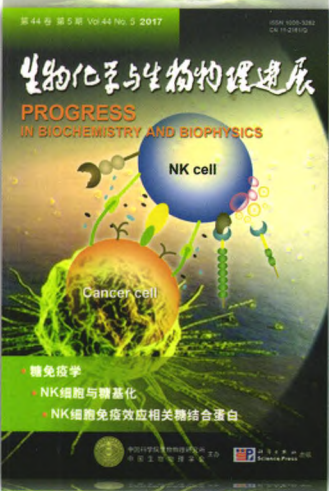
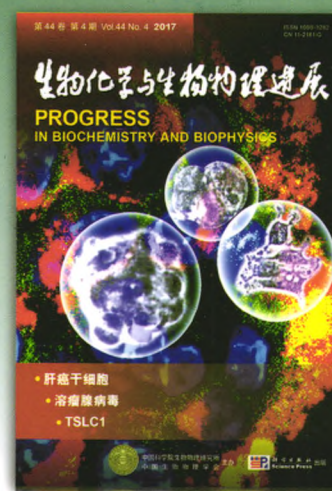
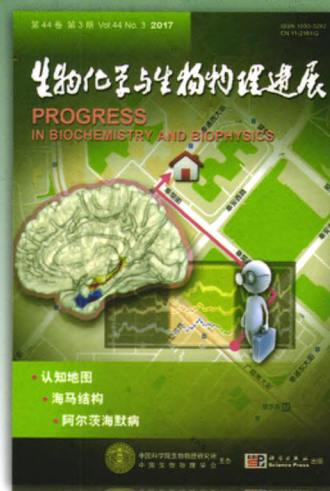
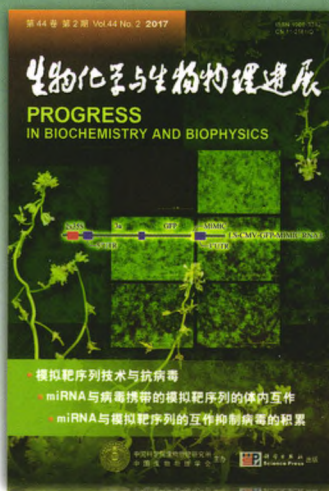
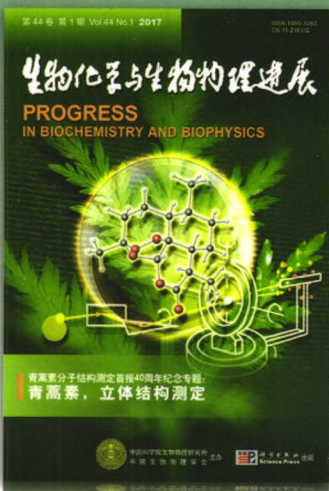
Tumor cell dormancy: how it performs in drug resistance and relapse

DAI Ya-Fei, XIANG Juan-Juan 460

Letter to Editor

Human nucleosome assembly protein 1-like 5(NAP1L5) promotes the proliferation of 293T cells

LI Min, ZHANG Hai-Tao, LI Zong-Hong, HOU Jun-Jie, XU Xiao-Lan 471



生物化学与生物物理进展

PROGRESS IN BIOCHEMISTRY AND BIOPHYSICS

PIBB

主管: 中国科学院
主办: 中国科学院生物物理研究所
中国生物物理学会
万方数据

主编: 王大成
出版: 科学出版社

ISSN 1000-3282
9 771000 328180