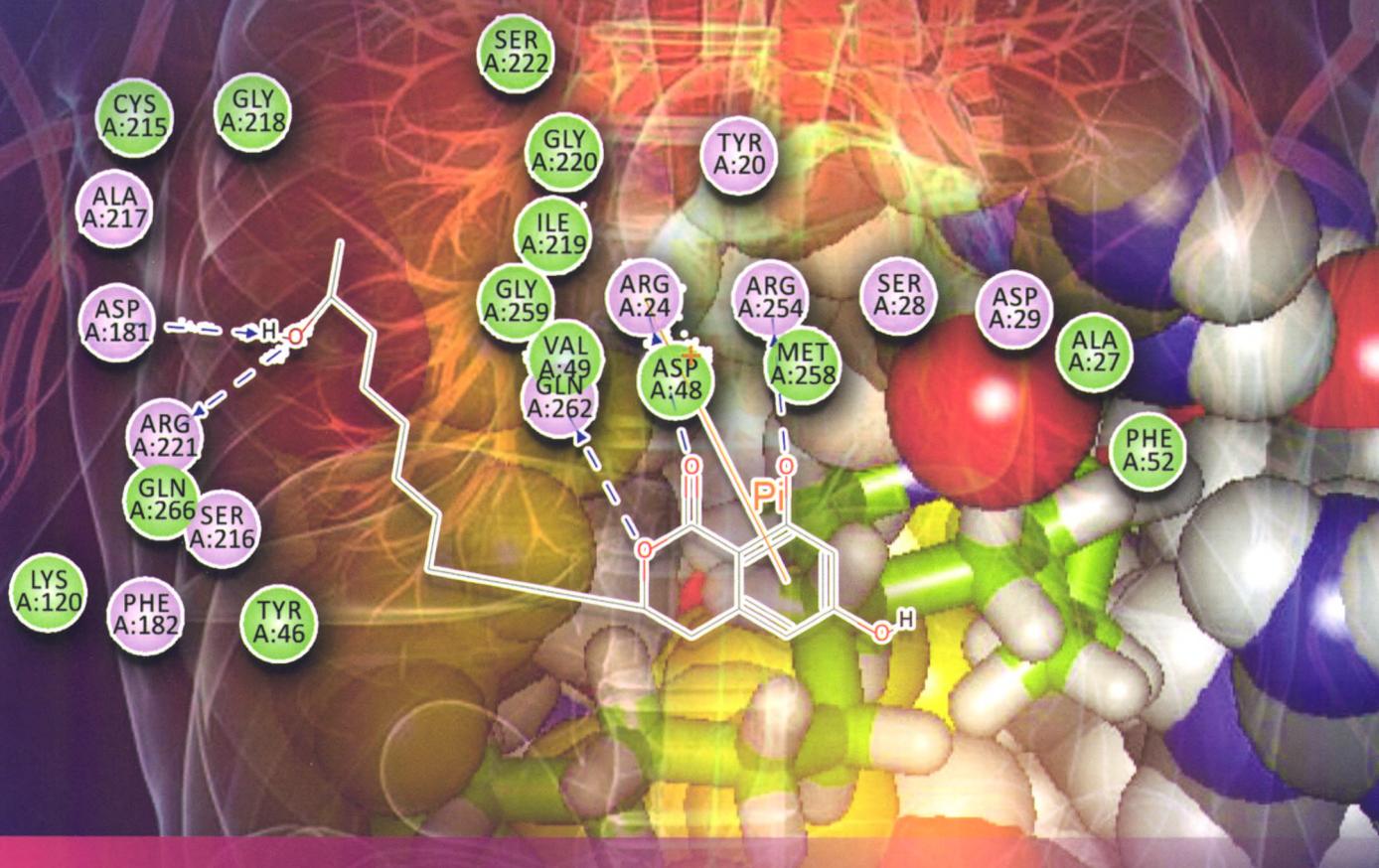


生物化学与生物物理进展

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
中国生物物理学会 主办

科学出版社 出版
Science Press

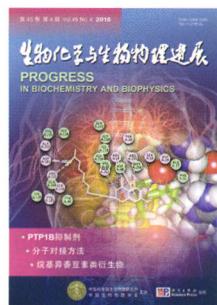
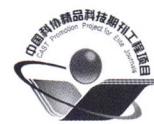
目 次

生物化学与生物物理进展

SHENGWUHUAXUE YU SHENGWUWULI JINZHAN

第45卷第4期

2018年4月20日出版 (月刊)



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 Clavepicetine 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

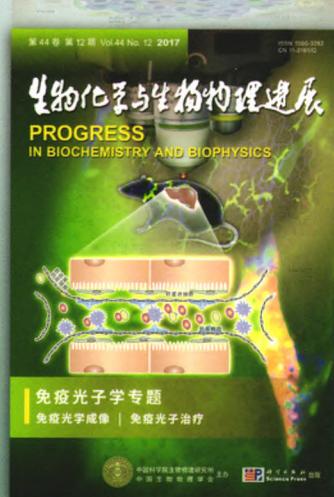
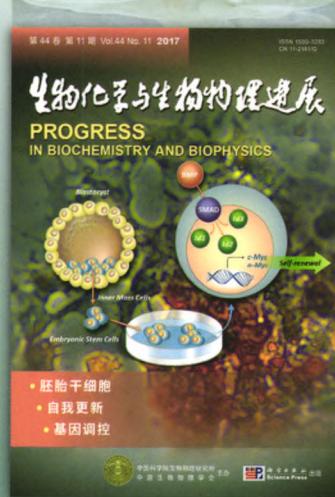
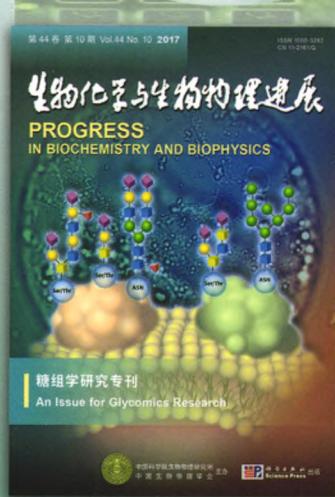
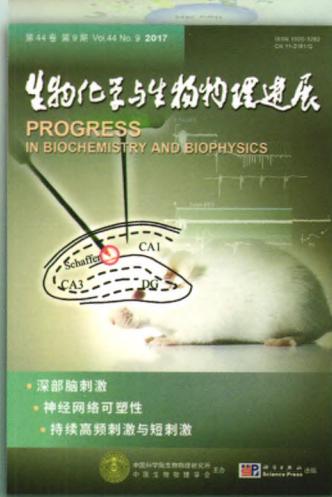
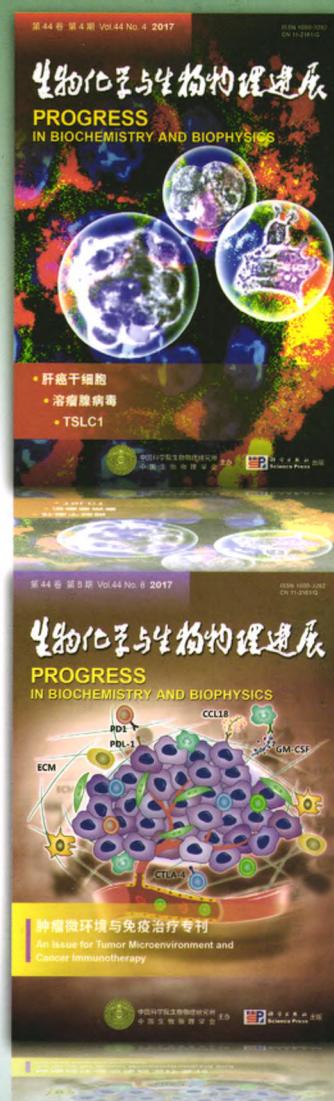
Tumor cell dormancy: how it performs in drug resistance and relapse

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

