生物分子模拟应用研究取得新进展

作者：writer 来源：中国科学院

本文原地址：https://www.iikx.com/news/progress/1458.html

本文仅供学习交流之用，版权归原作者所有，请勿用于商业用途！

近日，中国科学院大连化学物理研究所研究员李国辉团队与中科院上海生物化学与细胞生物学研究所研究员杨巍维团队合作，通过分子动力学模拟的手段，解释了胶质瘤细胞中关键氨基酸的磷酸化过程对肿瘤细胞生长的影响，相关结果以共同通讯作者的形式发表于《分子细胞》

杨巍维团队发现了磷酸甘油酸激酶(PGK1)的氨基酸T243磷酸化后可改变PGK1和底物的亲和力，从而促进PGK1糖酵解方向的活性，以及促进胶质瘤细胞的有氧糖酵解、细胞增殖和肿瘤生长。但是，仅依据实验无法在分子层面上，详细阐明T243磷酸化过程是如何影响PGK1与底物结合的分子机制。

为了回答这一关键科学问题，李国辉团队与杨巍维团队密切合作，运用分子动力学模拟的方法，针对T243磷酸化前后PGK1与底物结合的分子机制进行研究，并发现T243的磷酸化影响了另一关键氨基酸(K216)的侧链朝向，进而对PGK1和底物结合的关键相互作用产生影响，导致磷酸化前后底物与PGK1亲和力发生明显变化。这一发现，从分子层面对实验结果进行了验证，并为胶质瘤治疗的新策略提供了详细的理论依据。

更多 科学进展 请访问 https://www.iikx.com/news/progress/

本文版权归原作者所有，请勿用于商业用途，爱科学iikx.com转发