

## 四氢异喹啉化合物 CPU 23与硝苯啶的分子模拟及其构象分析

许国友 黄文龙 韦苞洋 华维一 彭司勋

(中国药科大学药物化学研究室,南京210009)

**摘要** 借助于 POLYGEN 软件包在 SGI-4D 25G 超级工作站上对四氢异喹啉化合物 CPU 23 和硝苯啶的化学结构进行了分子模拟。从分子模拟所得构象的分析比较发现:两者在空间构象及其有关性质方面存在一定相似性,从而进一步从理论上证实了药理试验结果。

**关键词** 四氢异喹啉衍生物; 硝苯啶; 钙拮抗剂; 分子模拟; POLYGEN 软件包

**【文摘013】** 国产海龙科药用鱼类研究进展 张朝晖,徐国钧,徐珞珊等. 中国海洋药物,1995,14(4):26

对国产海龙科药用鱼类从分类学研究、药材资源研究、组织学研究、化学成分研究、药理作用研究等7个方面的进展进行综述,全文综述文献31篇。

**【文摘014】** 二妙散生物碱类成分的定量分析

陈婷,徐强,严永清. 中国实验方剂学杂志,1995,1(2):20

在前报对二妙散水提物中的免疫抑制活性成分进行定性分析的基础上,应用 TLC 及 HPLC 法对其中的生物碱进行了定量测定,并与黄柏水提物中的各生物碱含量进行了比较,结果表明,二妙散中各生物碱的含量低于黄柏,其中小檗碱和巴马汀的含量减少幅度最大。

**【文摘015】** 大肠杆菌天门冬酰胺酶Ⅱ的基因克隆与表达 李晶,刘景晶,吴梧桐等. 药物生物技术,1995,2(4):8

用一对与大肠杆菌编码 L-天门冬酰胺酶Ⅱ (L-

ASP<sub>s</sub>Ⅱ) 的基因 ansB 两侧序列互补的寡核苷酸 L<sub>1</sub>、L<sub>2</sub> 作引物,以 L-ASP<sub>s</sub>Ⅱ 的野生型生产菌 CPU 210009 染色体为模板,经 PCR 扩增得到长约 1.6 Kb 的 DNA 片段。该片段通过以 LP<sub>1</sub>、LP<sub>2</sub> 为内引物的 PCR 反应,证明包含了 ansB 基因的编码序列。将此片段经 xba I、Hind Ⅲ 消化,插入质粒 PUC 18、PUC19 上构建重组质粒 PUA18、PUA19, 分别转化 As 1.1187, As 1.1193, HB101, 9637, JM107, 71/18, CPU 210009 等宿主菌,筛选得到 L-ASP<sub>s</sub>Ⅱ 酶活力明显提高的 8 株阳性转化子。在 1 L 生物反应器中,LB 培养基 37℃ 下培养 24 h, 其酶活在 6.2~31.8 IU/ml 之间。其中 CTA<sub>8</sub> 表达 L-ASP<sub>s</sub>Ⅱ 水平最高, 达到 31.8 IU/ml。各基因工程菌株较之野生型生产菌 CPU 210009, 其生产 L-ASP<sub>s</sub>Ⅱ 水平提高了 5~26 倍。而且 IPTG 诱导对工程菌表达 L-ASP<sub>s</sub>Ⅱ 的水平几乎无影响。SDS-PAGE 测得工程菌表达的 L-ASP<sub>s</sub>Ⅱ 分子量约为 140 Kd。薄层扫描结果显示: CTA<sub>7</sub>、CTB<sub>8</sub>、CTA<sub>9</sub> 所产生的 L-ASP<sub>s</sub>Ⅱ 占宿主菌可溶性蛋白总量的 28.3%、35.7%、33.6%。