

Spectroscopic study on the interaction mechanism between parecoxib and p38MAPK

Hong-jun ZHENG¹, Fu-de SUN², Wei-bing ZHAO³ & Xue-wen XU^{3*}

¹ *Anesthesiology Department, Jiulongpo People's Hospital, Chongqing 400000, P.R. China*

² *Anesthesiology Department, Penglai Traditional Chinese Medicine Hospital, Yantai, P.R. China*

³ *Anesthesiology Department, Chongqing Public Health Medical Center, Chongqing 400036, P.R. China*

SUMMARY. MAPK (mitogen-activated protein kinase) plays an important role in a variety of signal transduction pathways in mammalian cells. It has been found that p38 signaling pathway is an important branch of MAPK pathway. Parecoxib decreased the stress response and inflammatory response during perioperative period. It is speculated that the mechanism of reducing the expression of TNF- α , IL-1 and other proteins may not only directly inhibit cyclooxygenase, but also play a role by inhibiting the pathway implicated by p38MAPK. We used spectroscopy-based methods to study the interaction between parecoxib and p38MAPK under simulated physiological conditions. The analysis of all the theoretical data and experimental results show that parecoxib has a significant effect on the structure of p38MAPK. Parecoxib caused changes in the spatial conformation and microenvironment of p38MAPK.

RESUMEN. La MAPK (proteína quinasa activada por mitógeno) juega un papel importante en una variedad de vías de transducción de señales en células de mamíferos. Se ha encontrado que la ruta de señalización p38 es una rama importante de la ruta MAPK. Parecoxib disminuyó la respuesta al estrés y la respuesta inflamatoria durante el período perioperatorio. Se especula que el mecanismo para reducir la expresión de TNF- α , IL-1 y otras proteínas no solo inhibe directamente la ciclooxigenasa, sino que también juega un papel inhibiendo la vía implicada por p38MAPK. Utilizamos métodos basados en espectroscopía para estudiar la interacción entre parecoxib y p38MAPK en condiciones fisiológicas simuladas. El análisis de todos los datos teóricos y los resultados experimentales muestran que parecoxib tiene un efecto significativo en la estructura de p38MAPK. Parecoxib causó cambios en la conformación espacial y el microambiente de p38MAPK.

KEY WORDS: circular dichroism spectrum, fluorescence spectrum, p38MAPK, parecoxib, three-dimensional fluorescence.

* Author to whom correspondence should be addressed. *E-mail:* lizuima@hotmail.com