

- 245—247.
- [3] 曹萱龄等, 物理学(中册), 人民教育出版社, (1980), 98—99.
- [4] 赵凯华等, 电磁学(上册), 人民教育出版社, (1978), 155—156.

- [5] H. Mueller, *Phys. Rev.*, **53**(1940), 805.
- [6] W. P. Mason, *Piezoelectric Crystals and Their Application to Ultrasonics*, Van Nostrand, New York, (1950), 449, 289—290.
- [7] W. P. Mason, *Phys. Rev.*, **73**(1948), 1398.

小球状蛋白质的低频振动模式

蒋 最 敏

(中国科技大学基础物理中心)

蛋白质分子中原子振动的研究(包括理论计算和实验测量),对进一步弄清蛋白质功能的机制具有重要的意义。蛋白质的特征结构及其动力学性质是其执行生物功能所必须的。在一定温度下,蛋白质分子中的原子在其平衡位置发生振动。因此,研究蛋白质分子的空间结构及其活动性(尤其是蛋白质分子活性部分的活动性),对进一步了解蛋白质分子的结构、功能与动力学过程之间的联系具有重要的意义。大家知道,对于分子晶体,由于原子之间的键合情况和相互作用情况的不同,相应的振动光谱可分为内振动部分和外振动部分。内振动频率与相应的自由分子振动频率较接近,故振动频率较高,相应的动力学过程较快;而外振动却只具有较低的振动频率。因此,内振动部分和外振动部分分别形成两个不同的谱带,喇曼光谱能够很好地区分这两个谱带。和分子晶体相类似,蛋白质分子也具有不同的振动谱带,对应于不同类型的相互作用。例如,蛋白质分子的键长和键角的变化将引起体系较大能量的变化,它们具有较大的力常数,并且对应的振动频率较高。研究低频振动模式时,可以将键角和键长固定不变,使问题简单化。由于酶的催化作用主要涉及到较慢的动力学过程,因而人们对其低频振动模式的研究更感兴趣。本文主要介绍一种计算蛋白质分子低频振动模的方法,下面先简单地介绍一下蛋白质的空间结构。

蛋白质是由氨基酸通过肽键连接起来的生物大分子。蛋白质分子的构象是指蛋白质分子中所有原子在三维空间中的排布。蛋白质的分

子结构可以分为一级、二级、三级和四级结构^[1]。蛋白质分子的一级结构是指蛋白质分子中氨基酸的排列次序。蛋白质的功能不仅与氨基酸序列有关,而且与它们的空间结构有关。如果我们只了解蛋白质中氨基酸的次序,而不了解它们的空间结构,那末就不可能全面地阐明蛋白质结构与功能的关系。例如,胰凝乳蛋白酶中的三个活性氨基酸残基,虽然在肽链的氨基酸顺序上相距很远,但由于肽链的盘旋和折叠,使它们紧密接近,形成了一个凹形的活性部位。

对蛋白质分子的动力学过程的了解能进一步加深对蛋白质功能的认识。关于蛋白质分子振动模的计算已有许多报道^[2-4]。这里介绍牛胰蛋白酶抑制剂(bovine pancreatic trypsin inhibitor, 简称为 BPTI)本征模的计算结果。图 1 为 BPTI 空间结构和它的两个本征模的原子位移矢量的立体图。用一挡板(如纸片等)隔开左右两部分。使左眼只看到左边部分,右眼只看到右边部分,然后耐心地反复调节眼睛焦距,使得左边部分和右边部分移到一块,这时就能看到立体图形。图 1(a) 为 BPTI 空间结构的立体图,其中粗线代表主链,细线代表侧链, C^α 原子由数字标出。图 1(b) 为所计算的第 70 个本征模的振动位移矢量,本征模的频率为 118.8 cm⁻¹。图 1(c) 为计算所得的第 240 个本征模的位移矢量图,本征模的频率为 6.9 cm⁻¹,图中的两本征模的位移矢量均已放大,以便看得清楚。

解决蛋白质分子的振动计算问题,首先要



图1 牛胰蛋白酶抑制剂的分子空间结构和它的两个本征模原子位移矢量立体图

选一组合适的动力学变量，其次要设定由这组动力学变量描述的蛋白质分子的构象势能形式。根据孤立的BPTI蛋白质分子构象势能的数据，可以近似地认为，在平衡点附近的势能具有多维抛物线形，即可用动力学变量的二次函数来描写。在蛋白质分子中，可将其二面角作为动力学变量。二面角包括主链部分(ϕ, ψ)和侧链部分(χ)。BPTI中有58个氨基酸，动力学变量的数目为241个，其中主链部分占116个，侧链部分占125个。有了适当的动力学变量和相应的势能形式，并对相应的动力学矩阵进行求解，就可以得到所有的本征模。目前利用高速度、高精度的计算机可以实现这一点。

蛋白质分子的内部运动是千变万化的，但可将内部原子的振动模分为局域模和非局域模两种。其局域振动的特征时间为0.1ps，相当于振动频率为 350cm^{-1} ，非局域振动的特征时间为0.1—10ps，相当于振动频率在 $3.5\text{—}350\text{cm}^{-1}$ 之间。

有了一系列本征模，通过分析其本征矢，就可以了解振动的局域性。如图1(c)中，两个原子之间的位移矢量差极小，即单个原子的位移矢量在空间连续变化，表明该模属于非局域模。而图1(b)中的模为局域模。有了一系列本征模，就可以研究振动态密度，从而根据统计物理学计算其对热力学量(例如热容、熵)的贡献，并与其它模型(例如连续弹性体模型)所得的结果比较，以检验模型的合理性。有了一系列本征模，就可在一定的温度下计算蛋白质分子中原子的位移均方值，得到空间结构中的 α -螺旋结构和 β -折迭中每个残基的原子振幅大小，从而可以进一步了解蛋白质分子的功能机制。

- [1] 陶慰孙等, 蛋白质分子基础, 人民教育出版社, (1981), 178.
- [2] N. Go, *Proc. Jpn. Acad.*, **56** (1980), 414.
- [3] M. Tasumi et al., *Biopolymer*, **21**(1982), 711.
- [4] N. Go et al., *Proc. Natl. Acad. Sci.*, **80** (1983), 3696.