

## 温控分子动力学研究微管蛋白活性肽链的折叠机制

吴晓敏 祖元刚 杨志伟 付玉杰 周丽君 杨刚

东北林业大学森林植物生态学教育部重点实验室, 哈尔滨 150040

摘要:

运用温控和常温分子动力学方法, 研究了微管蛋白活性部位Pep1-28肽链的折叠机制, 总模拟时间为380.0 ns. 对于温控分子动力学, 逐渐降温可以清晰显示Pep1-28肽链的折叠途径, 发生明显折叠的温度约为550 K, 其折叠和去折叠可逆机制为 $U(>1200\text{ K}) \leftrightarrow I1(1200-1000\text{ K}) \leftrightarrow I2(800\text{ K}) \leftrightarrow I3(600\text{ K}) \leftrightarrow I4(450\text{ K}) \leftrightarrow F1(400\text{ K}) \leftrightarrow F2(300\text{ K})$ , 其中U为去折叠态构象, I1、I2、I3和I4是折叠过程中的四个重要的中间态构象, F1和F2是两个结构相近的折叠态构象. 对于常温(300 K)分子动力学, 其构象转变和折叠过程相当迅速, 很难观察到有效、稳定的中间态构象. 尤其引人注意的是, 其折叠态结构陷入了能量局域极小点, 与温控(300 K)的有较大差异, 两者能量差高达297.53 kJ·mol<sup>-1</sup>. 可见, 温控分子动力学方法不仅清晰地显示多肽和蛋白质折叠过程的重要中间态构象, 为折叠和去折叠机制提供直接、可靠的依据, 而且还有助于跨越较高的构象能垒, 促使多肽和蛋白质折叠以形成全局能量最低的稳定结构.

关键词: 微管蛋白 温控分子动力学 构象分析 折叠机制 中间态

收稿日期 2008-11-11 修回日期 2008-12-19 网络版发布日期 2009-01-23

通讯作者: 祖元刚 杨刚 Email: theobiochem@gmail.com; dicpyanggang@yahoo.com.cn

### 本刊中的类似文章

1. 韩公社; 阎隆飞; 王保怀; 张有民. 微管蛋白聚合及其与紫杉醇作用的量热学研究[J]. 物理化学学报, 1997, 13(11): 969-973
2. 徐志广; 许旋; 袁传能. 紫杉醚与 $\alpha\beta$ 微管蛋白的分子对接[J]. 物理化学学报, 2008, 24(10): 1839-1844
3. 杨勇; 王保怀; 李芝芬; 张有民; 韩公社; 阎隆飞. 微管蛋白的聚合和变性及紫杉醇的影响[J]. 物理化学学报, 1999, 15(02): 182-185

扩展功能

本文信息

PDF(4390KB)

服务与反馈

把本文推荐给朋友

加入我的书架

加入引用管理器

引用本文

Email Alert

文章反馈

浏览反馈信息

本文关键词相关文章

- ▶ 微管蛋白
- ▶ 温控分子动力学
- ▶ 构象分析
- ▶ 折叠机制
- ▶ 中间态

本文作者相关文章

- ▶ 吴晓敏
- ▶ 祖元刚
- ▶ 杨志伟
- ▶ 付玉杰
- ▶ 周丽君
- ▶ 杨刚