

A_S , 表示折叠的天然蛋白质可及表面面积;

A_B , 表示蛋白质折叠时被埋藏的可及表面面积,

$$A_B = A_T - A_S;$$

F_{AS} , 表示蛋白质埋藏面积所占的比例, $F_{AS} = A_B/A_T$;

E_{HP} , 表示疏水自由能。

A_T 与蛋白质分子量 M 的关系 C. Chothia^[4] 给出了一个简单的关系式

$$A_T = 1.44M \quad (1)$$

由上式得到的结果, 偏差较大, 且多为负偏差, 见表 1。本文根据误差理论将上式校正为

$$A_T = 1.44M + 200 \quad (2)$$

对一个球状物体来说, 根据表面 A 和体积 V 公式

$$A = 4\pi R^2 \quad (3)$$

$$V = \frac{4}{3}\pi R^3 \quad (4)$$

其中 R 是球半径。

得 A 与 $V^{2/3}$ 成比例。我们不妨假定分子的密度相同, 换言之, 单位质量的体积 $\bar{V}$ 相同, 于是

$$V = \frac{4}{3}\pi R^3 = M\bar{V}/N \quad (4')$$

式中 M 为分子量, N 为 Avogadro 常数。于是得到 A 与 $M^{2/3}$ 成比例。本文以 A_S 对 $M^{2/3}$ 作图, 如图 1。发现两者有较好的线性关系, 数学处理的结果是

$$A_S = 11.9M^{2/3} - 400 \quad (5)$$

于是得到

$$A_B = A_T - A_S = 1.44M - 11.9M^{2/3} + 600 \quad (6)$$

$$E_{HP} = 24A_B = 34.56M - 285.6M^{2/3} + 14400 \quad (7)$$

用上述公式, 我们计算了 15 种蛋白质的可及表面面积和埋藏面积, 从所得结果的偏差来看, 我们的结果比前人的要好些, 见表 1。

从这里我们可以看出, 蛋白质的可及表面面积、埋藏面积以及疏水自由能均可以通过简单的方程与分子

量联系起来, 这就使我们能够通过生物大分子的分子量去描述某些结构特征。

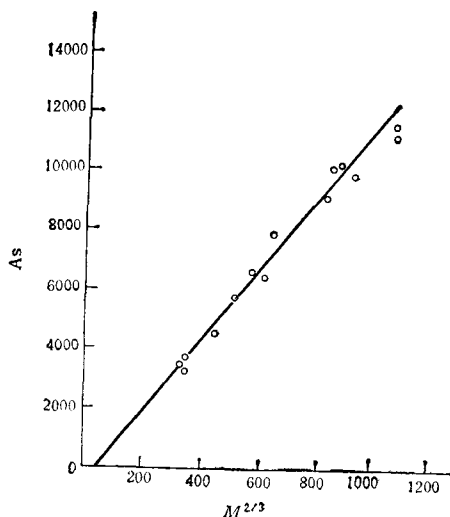


图 1 $A_S-M^{2/3}$ 图

参 考 文 献

- [1] Lee, B. and Richards, F. M.: *J. Mol. Biol.*, 1971, 55, 379.
- [2] Shrake, A. and Rupley, J. A.: *J. Mol. Biol.*, 1973, 79, 351.
- [3] Chothia, C.: *Nature (London)*, 1974, 248, 338.
- [4] Chothia, C.: *J. Mol. Biol.*, 1976, 105, 1.
- [5] Richards, F. M.: *Annu. Rev. Biophys. Bioeng.*, 1978, 6, 151.
- [6] Connolly, M. L.: *QCPE. Bull.*, 1981, 1, 75.
- [7] Connolly, M. L.: *Science*, 1983, 221, 709.
- [8] Richmond, T. L.: *J. Mol. Biol.*, 1984, 178, 63.

[本文于 1987 年 4 月 25 日收到]

科技消息

第一届分子生物物理学术讨论会征文通知

由中国生物物理学会分子生物物理专业委员会主办的第一届分子生物物理学术讨论会, 拟定于一九八八年十二月十二日至十五日在福建省厦门市召开。

本届学术讨论会以生物大分子的结构、运动、功能、改造为中心议题, 其主要内容包括: (一) 蛋白质、核酸等生物大分子的结构与功能研究; (二) 生物大分子的动力学研究; (三) 蛋白质工程及有关问题; (四) 生

物大分子构象理论与分子设计等分子生物物理问题。

论文摘要请于九月三十日前寄到北京 349 信箱生物物理学会吕克定同志处。每篇摘要限 A₄ 复印纸一页, 请用中文打印。上空 3cm, 下和左右空 2.5cm 边框。有关其它事宜请与吕克定同志联系。

[中国生物物理学会办公室]