

的集团,反映蛋白质内部不同区域的不同特征。后者与生物大分子的功能有更密切的联系。

自 1977 年第一篇关于蛋白质的分子动力学模拟的工作发表以来,这方面的论文已发表了几十篇。所研究的对象包括胰蛋白酶抑制剂,肌红蛋白,细胞色素 c,铁硫蛋白, DNA 和 tRNA。理论工作紧密与 X 射线晶体衍射,核磁共振,中子衍射等实验工作相结合,已成为研究生物大分子动力学的一个重要方面。

在此基础上又发展了随机动力学,活化动力学等方法。并将这些方法用于酶反应机理的研究及药物设计。

三、分子动力学方法的局限性

1. 分子动力学使用的是经典力学,解的是系统中所有原子的运动方程,没有考虑量子效应。不过对大分子来说,在 300°K 下这并不是一个严重的问题。

2. 原子运动轨迹依赖于势函数,而势函数是半经验性质的;势函数越可靠,分子动力学模拟的结果将越好。

3. 体系的大小有限制,仅仅有限数目的粒子可以被模拟;目前已经模拟的最大系统含 7000 个原子。

4. 模拟的时间范围也受限制。使用现代的计算机,模拟的时间从几十微微秒到毫微微秒。

后两条限制随着计算机速度的提高,以及理论或技术的发展将会改变。

生物大分子的分子动力学模拟工作还刚刚开始,可以期望此方法在今后几年内将更广泛地被应用于各种生化问题,从而提供更多的有关生物大分子内部动力学及生化反应方面的信息。

参 考 文 献

- [1] Frauenfelder, H. et al.: *Nature* (London), **280**, 558, 1979.
- [2] Wagner, G. et al.: *Nature* (London), **275**, 274, 1978.
- [3] Holowka, D. A. et al.: *Biochemistry*, **15**, 3379, 1976.
- [4] Genzel, L. et al.: *Biopolymers*, **18**, 507, 1976.
- [5] McCammon, J. A. et al.: *Nature* (London), **267**, 585, 1977.
- [6] van Gunsteren, W. F. et al.: *Proc. Natl. Acad. Sci. USA*, **80**, 4315, 1983.
- [7] Karplus, M.: *Structural Molecular Biology* (Davies, D. B. Edited), Plenum, New York, 1981.
- [8] Karplus, M.: Summer college in biophysics, International Centre for Theoretical Physics, 1982.
- [9] Karplus, M.: *Mobility and function in protein and nucleic acid*. Pitman, London (Ciba Foundation symposium 93), 1982.
- [10] Workshop: *Molecular Dynamics Methods and Protein Structure*, Chapel Hill, USA, 1984.
- [11] Karplus, M. et al.: *CRC Crit. Rev. Biochem.*, **9**, 293, 1981.
- [12] Clementi, E.: *Computational aspects for large chemical system*, Sping-Verlag 1980.
- [13] Olson, W. K.: «访华在吉林大学演讲稿», 1981.
- [14] Gear, C. W.: *Numerical initial value problems in ordinary differential equation*.
- [15] van Gunsteren, W. F.: *Molecular Physics*, **40**, 1015, 1980.

[本文于 1984 年 12 月 5 日收到]

短梗霉多糖的性质和应用

梁 金 虎

(中国科学院生物物理研究所,北京)

天然多糖多取自植物的根、茎和果实以及海藻,也有许多则利用微生物来生产。它们的特点是无毒无害,食用性好,不会引起三致(致畸,致癌和致突变)。美、日利用微生物发酵生产多糖,广泛应用于工业,农业,医药卫生和食

品工业等领域。目前,天然多糖的世界年产量约 50 万吨^[1]。

本文主要介绍一种较重要的微生物多糖——短梗霉多糖(Pullulan)的性质及其应用。

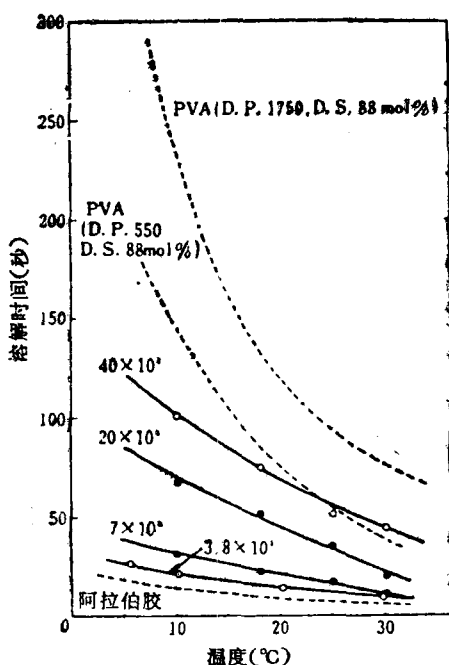


图3 短梗霉多糖的水溶性^[1]

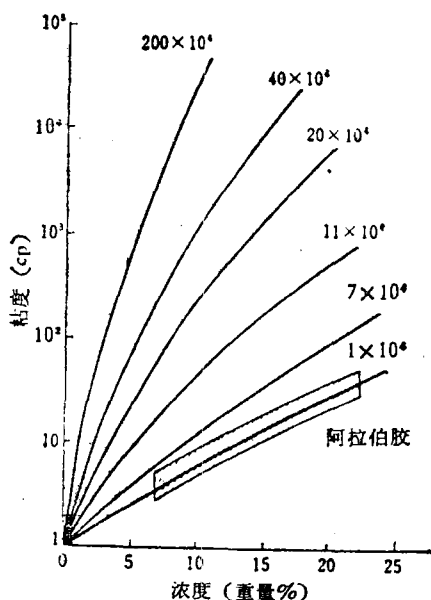


图4 短梗霉多糖水溶液浓度与粘度的关系^[1]

下,其热稳定性相当强;与其它多糖不同,粘度并不急剧下降。例如分子量为30万的短梗霉多糖,在90℃加热1小时,粘度下降约10%,但对分子量为6—10万的产品来说,粘度下降很多。pH3.0以下时,则因短梗霉多糖被水解

而粘度降低,在强碱性条件下加热时,因其为一般碳水化合物,则必然着色。

短梗霉多糖与盐类共存时,其粘度变化不大。在有特殊金属离子如, Fe^{2+} , Cu^{2+} , Ca^{2+} , Mn^{2+} , Ti^{4+} 和 B^{3+} 存在时,则其粘度增大。而 NaCl 对其粘度几乎没有影响,故添加到食品中时,它不会发生粘度变化。

4. 粘着性

粘着性是短梗霉多糖的另一重要特性。它对金属,玻璃,混凝土,纸,纤维,木材等均具有很强的粘着性。例如:分子量为15万的短梗霉多糖与木材胶合在一起时粘结强度约有70 kg/cm^2 ,分别为氧化淀粉,玉米淀粉,水泥和酚醛树脂粘结强度的1.8—6倍。但因短梗霉多糖的耐水性差,为提高其强度必须用乙二醛等作耐水处理。

短梗霉多糖与氢氧化铝组成的胶粘剂胜过聚乙烯醇,当 $\text{Al}(\text{OH})_3$ 的比例超过40%时,张力强度达到最大。

5. 成膜,可纺和可塑性

短梗霉多糖具有良好的成膜性。将5—20%的短梗霉多糖水溶液浇铸在金属板或滚筒上干燥,即可按需要制成一种透明、有光泽和强度良好的薄膜。其强度类似玻璃纸。与其它薄膜相比,它具有显著的氮氧不透过性^[7]。它还具有热封性好等特点,因此,使其成为一种有效的包装材料 and 密封物质。选择适当分子量的短梗霉多糖,延伸成丝,其强度与尼龙大致相当。

短梗霉多糖粉末加适量水,入模,加热,加压或成型,可制成简单型体。成品无色透明,表面光泽与聚苯乙烯树脂加工品相似,但弹性较大,并可随意染色;添加颜料后不降低其强度。用它与其它耐水性薄膜复合,可制成多层包装材料。

短梗霉多糖成型时无须添加可塑剂和稳定剂,其稳定性不因温度变化而改变。对食品无害,不会产生未反应的单体等。普通成型品和发泡制品等,用后弃置室外,经雨淋溶解,随后被微生物完全分解;焚烧时也不产生有害气体,故被誉为无公害“塑料”。

三、应 用

1. 在食品工业中的应用

短梗霉多糖的突出特点是无毒无害,以及良好的食用性,故在食品工业中用作食物配料与添加剂、粘着剂、抗氧化剂、包装材料和被膜剂等。

配料 由于短梗霉多糖是水溶性的,又不易被体内消化酶消化,是一种无害的低热量的食品配料。用适当比例的面粉,直链淀粉和短梗霉多糖混合制成风味不同的人造米,鸡蛋面,通心面或烘焙饼,热量比一般产品低一半。添加有短梗霉多糖的食品外观与一般食品相似,并能充分满足限制摄入热量的要求。

品质改良剂 值得注意的是,高分子量的短梗霉多糖似对食品中的高分子蛋白质有特殊的作用。例如,往豆浆和氯化镁的混合物中加入0.01—0.3%的短梗霉多糖,可很容易地制成豆腐,效果与用石膏或 δ -葡萄糖酸内脂凝固剂一样好。这样制成的豆腐色泽好,而其固有的风味与芳香保持不变^[20]。

煮饭时,添加相当于米量的0.05%左右的短梗霉多糖,能使饭粒保持“膨松”。添加约0.1%的短梗霉多糖,可有效地保持焙烤碎鱼肉制品的形状或体积^[8],还能防止变质。特别是与各种天然多糖一起少量添加,有助于提高肉制品的粘着性和持水性。

粘着剂 将牛肉,猪肉或禽肉碎块与短梗霉多糖混凝成立方体,棒状或片状,并干燥至含水量为10—15%,便可制成快餐用的松脆或半干肉制品。在加工中,短梗霉多糖显示出良好的凝固性,粘着性和抗氧化性,而不带有任何不应有的气味。

抗氧化剂 近来,已注意到风味和口味的改变,可能与食品中油脂氧化酸败造成的毒害有很大关系。由于 O_2 , N_2 极难透过短梗霉多糖膜(表1),故用它制成的薄膜和涂层是防止高脂肪食品氧化酸败和酸价升高的一种极有效的隔膜。因此,它完全适合包装,含油脂量高的食品及油脂制品,如花生,糕点等,同样也适用

表1 粘多糖膜与其它成份膜的氧气透过率的比较^[7]

样 品	氧气透过率 25°C, atm, 24h (ml/m ²)
短梗霉多糖 (Pullulan)	0.5
聚乙烯醇	0.3
玻璃纸	4.5
防潮玻璃纸	8.6
尼龙	50—100
聚乙烯	500—1300
聚丙烯	2000—5000
聚苯乙烯	5000—7000

注:膜厚为30 μ m,相对湿度为60%。

于包装维生素强化食品,酶制剂,药物等易氧化变质物品。由表2可见短梗霉多糖膜的防氧化效果较好。

表2 油脂物封存在薄膜中三日后的^[1]过氧化值 (meq/ μ g)

油脂物	零时	三 日			
		无包装	短梗霉多糖	玻璃纸	聚乙烯醇
油酸	0.74	8.0	2.7	2.7	4.0
亚油酸	2.47	199.5	5.4	6.1	56.1
鳕鱼油	0.76	119.0	7.0	51.0	70.0

被膜剂 根据作者本人的实验,以一定比例的水与短梗霉多糖配制成的乳化被膜剂,涂布在水果,蔬菜上,能防止鲜度下降,减少干耗,涂在鸡蛋上还能提高蛋壳强度(表3),增加表面光洁度。

表3 鸡蛋的抗压强度 (kg/cm²)

类别	抗压强度*	抗压强度增高率(%)
对照	5.00	—
处理1	5.34	6.8
处理2	6.13	22.6
处理3	5.66	13.2
处理4	5.00	—

* 在30 $\pm$ 1°C。相对湿度40—45%的恒温箱中存放66天。

注 处理4为聚乙烯醇涂料,其余为以短梗霉多糖为主的涂料。

2. 在其它工业中的应用

短梗霉多糖还可应用于化妆品^[9], 涂料^[10], 光敏树脂^[11-13], 肥料^[14,15], 铸造^[16], 烟草工业^[17]以及制药工业^[18,19]等。例如: 在制药工业中用20%的短梗霉多糖代替动物胶, 可简化防氧化胶囊的生产^[18,19]; 添加5—10%的短梗霉多糖, 可适当提高软胶囊的柔性, 弹性, 粘着性, 使它在肠胃预定区域溶解, 释放内容物, 以提高药物的疗效。短梗霉多糖还可经醚化, 酯化, 氧化和交联等化学改性制成非水溶性, 低膨胀性的其它衍生物, 扩大应用范围。总之, 短梗霉多糖的应用前景是广阔的。

参 考 文 献

- [1] 杉本要: 発酵と工業, Vol. 36. No. 2 p 98—108, 1978.
- [2] H. Bender et al.: *Biochem. Z.*, Vol. 334, p97, 1961.
- [3] S. Ueda et al.: *Appl. Microbiol.*, Vol. 11, p211,

- 1963.
- [4] B. J. Catley: *Appl. Microbiol.*, Vol. 22, p641, 1971.
- [5] 二宮英治, 木崎忠雄: 農化誌, 43, 115, 1969.
- [6] K. Wallenfels et al.: *Biochem.*, 7, 341, 433 1965.
- [7] 杉本要: 化学工業, p71—77, 1983年1月号.
- [8] *Unexamined Patent Application Gazette*, S52—41252 (HBLI)
- [9] *Published Examined Patent Application Gazette*, S52—31019 (HBLI)
- [10] *Unexamined Patent Application Gazette*, S50—145447 (HBLI) (SCCL)
- [11] *ibid.*, S50—79322 (HBLI) (SCCL)
- [12] *ibid.*, S50—77102 (HBLI) (SCCL)
- [13] *ibid.*, S50—77103 (HBLI) (SCCL)
- [14] *ibid.*, S50—100470 (HBLI) (SCCL)
- [15] *ibid.*, S51—107954 (HBLI) (SCCL)
- [16] *ibid.*, S51—119321 (HBLI) (SCCL)
- [17] *ibid.*, S51—1699 (HBLI) (SCCL)
- [18] *ibid.*, S50—135215 (HBLI) (SCCL)
- [19] *ibid.*, S51—101117 (HBLI) (SCCL)
- [20] *Published Examined Patent Application Gazette*, S52—24110 (HBLI)

【本文于1985年1月3日收到】

研究工作

水牛脑神经节苷脂的分离纯化

夏霞娟 崔肇春* 顾天爵

(上海第一医学院 生化教研室)

因神经节苷脂(gangliosides, 简称 GLS)的生物学功能的研究日益受到重视^[1-4], 对各种 GLS 纯品的需求越来越迫切, 而目前市场上尚无供应。本文选用水牛脑为材料, 参考有关方法^[5-9], 择优组合或略加改进, 提取纯化了水牛脑中四种主要的 GLS。

提取 GLS 是利用其亲水脂分子特性, 用氯仿-甲醇混合液抽提脑组织的丙酮粉, 将抽提物进行 Folch 分配^[10], 使 GLS 从有机相溶媒转移到水相, 然后进行 DEAE-Sephadex A-25 离子交换与 Iatrobeds 吸附柱层析。Iatrobeds 是近年发展起来的新型多孔性硅胶球状物, 具有颗粒大, 表面光滑、流速高、分辨力强的特点^[8]。

一、材料与方 法

1. 新鲜水牛脑; DEAE-Sephadex A-25, Pharmacia 厂; Iatrobeds 6RS-8060, 颗粒直径 60 μ m, 日本 Iatron 厂; 高效薄板层析 (HPTLC) 板, Silica gel 60, Merck 厂; 硫代巴比妥酸, Fluka 厂; N-乙酰神经氨酸, Sigma 厂; 人脑灰质 GLS 标准品和间苯二酚系由 Yale 大学于宽仁 (K. R. Yu) 教授赠送; 其他试剂均系分析纯或化学纯。

中国科学院科学基金资助的课题。

* 大连医学院生化教研室交换师资。