

- [56] 李芳生等;《永寿大骨节病考察文集》, 1984, 338 页, 人民卫生出版社.
- [57] F. Y. Yang (杨福愉), F. Huang (黄芬), Z. H. Lin (林治煥), In "3rd International Symposium of Selenium on Biology and Medicine", Beijing, 1984 (in press).
- [58] 杨福愉, 沃维汉;《中国科学》(待发表).
- [59] 沃维汉, 杨福愉;《中国科学》(待发表).
- [60] Raison, J. K. et al.: in "Encycl. Plant Physiology" (Ed. Stumpf, P. K.), 1979.
- [61] Lyons, J. M. et al.: in "Low Temp. Stress in Crop Plants" (Eds, Lyons J. M. et al.), 1979, 1.
- [62] Willemot, C. et al.: in "Low Temp Stress in Crop Plants" (Eds. Lyons, J. M. et al.), 1979, 441.
- [63] 王育启, 王洪春等:《植物生理学报》, 2: 185, 1981.
- [64] 鲍风等:《植物学报》26, 1: 60, 1984.
- [65] Peoples, T. R. et al.: *Plant Physiol.*, 62 326, 1978.
- [66] Chapman, D. J. et al.: *Plant Physiol.*, 72, 225, 1983.
- [67] 杨福愉等:《科学通报》, 6: 370, 1983.
- [68] 杨福愉等:《植物学报》, (待发表).

[全文完]

氨基酸的亲、疏水性研究

I. 各种氨基酸及其残基的疏水性标度

温元凯 程门燕

(中国科学技术大学量子生物学实验室)

蛋白质由 20 种氨基酸组成。它们的亲、疏水性的相互作用是维持蛋白质三级结构最重要的作用力之一^[1]。有些变性的蛋白质(即随机松散分布的多肽链)能够自动地重新折叠起来,成为具有生物活性、高度有序的天然构象,就是疏水基起着关键作用。因此,研究各种氨基酸侧链亲水性或疏水性的大小及其相互作用(该方面的工作是七十年代才开展起来的),对于深入了解蛋白质、核酸等生物大分子的结构与功能,具有重要意义。

一、疏水性的定义

一般来说,基团的疏水性与其极性呈正比。非极性大意味疏水性强。这是因为,水是强极性的,而非极性的有机分子中没有任何分离的净电荷,因此二者之间没有有效的吸引,而水分子之间的吸引却是可观的,故能把非极性液体的分子“挤出去”,使之几乎完全不溶于水^[2]。我们就认为该液体疏水性很强。

但是,蛋白质各种残基的疏水性与极性还是有区别的^[3]。极性是从原子观点定义的一种性质。笼统地说,若分子中电荷分布不均匀,正负

电荷的重心不相重叠,则称分子具有极性。对于蛋白质大分子,Chothia^[10]定义 N、O、S 为极性原子,侧链带有 N、O、S 的氨基酸残基为极性残基,侧链上只有 C 原子的残基为非极性残基。一般认为,非极性残基埋在蛋白质分子内部形成一个疏水核,它被和溶剂接触的外层极性残基包着。但是,全部残基的疏水性与从原子观点定义的极性毕竟不是一回事。有人通过实验,研究氨基酸从水中转入有机试剂中自由能的变化来定义疏水性^[6,7]。Lee 等人^[5,8-13]使用不同方法,分别测定了蛋白质的 X 射线结构,经验地定义了氨基酸的疏水性。现将这些工作分别介绍如后。

二、各种氨基酸疏水性的标度与讨论

1. 从基团质心平均减少的距离 $\langle r \rangle$ ^[3](The average reduced distance from the centre of mass)

$$\text{定义 } r = \frac{R}{R_g}$$

R: 从蛋白质质心到分子中某一残基的距离。

R_g : 蛋白质旋转半径的均方根。

把 r 分成 0.05 一个区间的不连续区域, 得到从基团质心平均减少的距离 $\langle r \rangle$ 的计算公式:

$$\begin{aligned}\langle r \rangle &= \sum_k P_k [0.05(k-1) + 0.025] \\ &= \sum_k P_k r_k\end{aligned}\quad (1)$$

$$(\Delta r^2)_{N^{\frac{1}{2}}} = \left\{ \sum_k P_k (r_k - \langle r \rangle)^2 \right\}^{1/2} / N^{\frac{1}{2}} \quad (2)$$

其中, $P_k = \frac{N_k}{N}$.

N 蛋白质样品中某一残基的总数;

N_k 某一残基在区间 k 内的数目;

r_k 第 k 个区间内减小的半径值。

蛋白质样品 19 个, (选择条件详见文献)。其坐标取自 Brockhaven 国家实验室蛋白质数据库。代入公式 (1)、(2) 计算 $\langle r_a \rangle$, $\langle r_s \rangle$ 得表 1。

$$\langle r_a \rangle = \frac{\text{从蛋白质质心到 } \alpha \text{ 碳原子的距离}}{R_g}$$

$$\langle r_s \rangle = \frac{\text{从蛋白质质心到某一远处碳原子的距离}}{R_g}$$

根据表 1 中 $\langle r_a \rangle$ 值的大小, 把氨基酸分成三类:

疏水性: ($\langle r \rangle \leq 0.88$): Cys. Phe. Ile. Leu. Met. Val. Trp.

中性: ($0.88 < \langle r \rangle \leq 0.95$): Ala. His. Tyr.

亲水性: ($\langle r \rangle > 0.95$): Asp. Glu. Gly. Lys. Asn. Pro. Gln. Arg. Ser. Thr.

把类似的分类方法应用于 $\langle r_s \rangle$ 得到同样结果, 反 Tyr 落到亲水范围, 从表 1 还可观察到, 在大多数情况下的疏水残基 $\langle r_s \rangle < \langle r_a \rangle$, 亲水残基 $\langle r_s \rangle > \langle r_a \rangle$, 这说明疏水侧链倾向于靠近蛋白质内部的疏水核, 而亲水侧链偏于分子较外部被水包围的亲水层。可以推断, $\langle r \rangle$ 值小的残基是疏水性的, 容易出现于蛋白质分子内部, $\langle r \rangle$ 值大的残基以亲水性为特征, 易出现于分子外部。

2. 平均侧链倾角 $\langle \theta \rangle^{[3]}$ (average side-chain

表 1 氨基酸基团质心减小的距离

氨基酸	用于计算每一氨基酸 $\langle Y_s \rangle$ 的侧链原子	$\langle r_a \rangle$	$\langle r_s \rangle$
Ala	C $^{\beta}$	0.93 $\pm$ 0.02 ^a	0.94 $\pm$ 0.02
Asp	O $^{\beta_1}$	1.01 $\pm$ 0.02	1.08 $\pm$ 0.03
Cys	S $^{\gamma}$	0.88 $\pm$ 0.03	0.84 $\pm$ 0.04
Glu	O $^{\alpha_1}$	1.02 $\pm$ 0.02	1.12 $\pm$ 0.03
Phe	C $^{\zeta}$	0.78 $\pm$ 0.03	0.73 $\pm$ 0.03
Gly		1.00 $\pm$ 0.02	
His	N $^{\alpha_2}$	0.89 $\pm$ 0.04	0.92 $\pm$ 0.05
Ile	C $^{\beta_1}$	0.79 $\pm$ 0.02	0.76 $\pm$ 0.02
Lys	N $^{\zeta}$	1.05 $\pm$ 0.02	1.23 $\pm$ 0.02
Leu	C $^{\beta_1}$	0.85 $\pm$ 0.02	0.82 $\pm$ 0.03
Met	C $^{\epsilon}$	0.84 $\pm$ 0.03	0.83 $\pm$ 0.04
Asn	C $^{\gamma}$	0.98 $\pm$ 0.02	1.04 $\pm$ 0.02
Pro	C $^{\gamma}$	1.00 $\pm$ 0.02	1.04 $\pm$ 0.03
Gln	C $^{\beta}$	1.02 $\pm$ 0.03	1.11 $\pm$ 0.03
Arg	N $^{\gamma_1}$	0.98 $\pm$ 0.03	1.09 $\pm$ 0.03
Ser	O $^{\gamma}$	1.02 $\pm$ 0.02	1.04 $\pm$ 0.02
Thr	C $^{\gamma_2}$	0.99 $\pm$ 0.03	1.02 $\pm$ 0.02
Val	C $^{\gamma_1}$	0.81 $\pm$ 0.02	0.81 $\pm$ 0.02
Trp	C $^{\gamma_2}$	0.83 $\pm$ 0.04	0.87 $\pm$ 0.04
Tyr	O $^{\gamma}$	0.93 $\pm$ 0.03	1.03 $\pm$ 0.03

$$a: (\Delta r^2)_{N^{1/2}}$$

orientational angle)

定义 θ 是蛋白质质心—C $^{\alpha}$ 与 C $^{\alpha}$ —侧链原子两矢量间之夹角, 称为侧链倾角。

把 0—180° 分成 3.6° 为一区间的 50 个区域, 则平均侧链倾角 $\langle \theta \rangle$ 的计算公式

$$\langle \theta \rangle = \sum_{k=1}^{50} q_k [3.6(k-1) + 1.8] \quad (3)$$

$$\begin{aligned}\langle \Delta \theta^2 \rangle_{N^{\frac{1}{2}}} &= \langle \Delta \theta^2 \rangle^{\frac{1}{2}} / N^{\frac{1}{2}} \\ &= \left\{ \sum_{k=1}^{50} q_k (\theta_k - \langle \theta \rangle)^2 \right\}^{\frac{1}{2}} / N^{\frac{1}{2}} \quad (4)\end{aligned}$$

其中, $q_k = n_k / N$.

n_k 是第 k 个区间出现侧链倾角 θ 的数目。

将 19 种蛋白质样品 (同标度 1) 的坐标代入公式 (3)、(4) 计算 $\langle \theta \rangle_A$ 、 $\langle \theta \rangle_B$ 、 $\langle \theta \rangle_C$ 、(分别代表较小蛋白质组, 较大蛋白质组和全部 19 种样品的 $\langle \theta \rangle$ 值)。和 $\langle \theta \rangle_{in}$ (B 组分子内区的 $\langle \theta \rangle$ 值), $\langle \theta \rangle_{out}$ (B 组分子外区的 $\langle \theta \rangle$ 值) 得表 2。

根据表 2 中 $\langle \theta \rangle_C$ 值, 把氨基酸分成三类:

表 2 氨基酸的平均侧链倾角 $\langle\theta\rangle$

氨基酸	A 组 $\langle\theta\rangle_A$	B 组			C 组 $\langle\theta\rangle_C$
		$\langle\theta\rangle_B$	$\langle\theta\rangle_{in}$	$\langle\theta\rangle_{out}$	
Ala	81 ± 4^b	91 ± 3	91 ± 5 97 ± 4	91 ± 4 74 ± 6	87 ± 3
Asp	69 ± 5	72 ± 4	82 ± 7	68 ± 4	71 ± 3
Cys	113 ± 6	88 ± 8	83 ± 11	93 ± 10	104 ± 5
Glu	71 ± 4	73 ± 4	77 ± 8	72 ± 5	72 ± 3
Phe	120 ± 6	100 ± 5	86 ± 8	111 ± 5	108 ± 5
His	92 ± 8	90 ± 6	89 ± 10	90 ± 8	90 ± 5
Ile	114 ± 5	100 ± 4	94 ± 5	107 ± 5	105 ± 3
Lys	67 ± 3	62 ± 3	89 ± 11	60 ± 3	65 ± 2
Leu	112 ± 5	101 ± 4	96 ± 5 103 ± 4	104 ± 4 89 ± 8	104 ± 3
Met	107 ± 8	95 ± 7	80 ± 11	103 ± 8	100 ± 5
Asn	64 ± 5	73 ± 4	86 ± 10	70 ± 4	70 ± 3
Pro	78 ± 6	78 ± 4	85 ± 9	76 ± 5	78 ± 4
Gln	63 ± 5	68 ± 4	90 ± 8	64 ± 4	66 ± 3
Arg	85 ± 6	79 ± 5	85 ± 10	76 ± 6	81 ± 4
Ser	87 ± 5	82 ± 3	95 ± 6	77 ± 6	83 ± 3
Thr	80 ± 5	84 ± 4	91 ± 7	82 ± 4	83 ± 3
Val	88 ± 5	96 ± 3	100 ± 4 98 ± 3	92 ± 4 83 ± 8	94 ± 3
Trp	104 ± 9	90 ± 6	83 ± 8	97 ± 8	94 ± 5
Tyr	90 ± 6	80 ± 4	74 ± 8	82 ± 4	83 ± 3

注: $b: \langle\Delta\theta\rangle^2_{N^{1/2}}$ 疏水性: ($\langle\theta\rangle > 95^\circ$): Cys. Ile. Leu. Met.中 性: ($85^\circ < \langle\theta\rangle < 95^\circ$): Ala. His.
Val. Trp.亲水性: ($\langle\theta\rangle < 85^\circ$): Asp. Glu. Lys. Asn.
Pro. Glu. Arg. Ser. Thr. Tyr.

Gly 无侧链,没有考虑在内。

值得注意的是,蛋白质分子的大小对氨基酸疏水性影响很大。由表 2 知,对 Cys. Phe. Ile. Leu. Met. Trp 有 $\langle\theta\rangle_A > \langle\theta\rangle_B$ 。这可由几何效应和疏水相互作用来解释。大多数疏水侧链较大,在较小的蛋白质中,几何变形力增强以使位于蛋白质-溶剂界面上的疏水基与溶剂不接触。在较大蛋白质中,侧链能够占据一定空间,与溶剂排斥作用较小,故 $\langle\theta\rangle_B < \langle\theta\rangle_A$ 。

在 A 组和 B 组中, Tyr 和 Ala 表现出的疏水性十分不同,这可由氨基酸残基中疏水基和亲水基的相互竞争予以解释。以 Tyr 为例。对较小蛋白质组(氨基酸数目 54—153) $\langle\theta\rangle_A$ 落在

中性区,较大蛋白质组(氨基酸数目 > 194) $\langle\theta\rangle_B$ 落在亲水区。且对 A 组蛋白质 $\langle\theta\rangle_{in} = (84 \pm 8)^\circ$, $\langle\theta\rangle_{out} = (102 \pm 4)^\circ$, $\langle\theta\rangle_A = (90 \pm 6)^\circ$ 即 $\langle\theta\rangle_A > \langle\theta\rangle_{out} > \langle\theta\rangle_{in}$ 。这是因为, Tyr 由 $-\text{CH}_2-$ 高度非极性的苯环以及与苯环相连的极性羟基三者组成,刚性较强,其 C_α 位于内部使苯环埋入,露出 $-\text{OH}$, C_α 离分子质心越远的 Tyr 残基,变形力越大。使 Tyr 与水接近时呈疏水性,在蛋白质内部时呈亲水性(即 $\langle\theta\rangle_{out}$ 大, $\langle\theta\rangle_{in}$ 小)。Tyr 是唯一的 $\langle\theta\rangle_B < \langle\theta\rangle_C$ (θ_B 是蛋白质 $-C_\alpha$ 与 $C_\alpha-C_\beta$ 间矢量之夹角)远大于 $\langle\theta\rangle_C$ 的氨基酸。 $\langle\theta\rangle_C$ 的高值反映出分子主干迫使 $-\text{CH}_2-$ 伸向内部, $-\text{OH}$ 伸向外部,从而使 $\langle\theta\rangle_C$ 减小。

3. 平均围绕 (average surrounding) 疏水性标度 $\langle H \rangle$ ^[9]

定义“围绕疏水度”为每个残基周围半径在 $8 \text{ \AA}$ 以内的氨基酸残基的 Nozaki-Tanford-Jones^[6,7] 指数的总数。

$$H_i = \sum_{j=1}^{20} L_{ij} h_j$$

其中 L_{ij} 是蛋白质中与第 j 个残基结合的 i 种围绕残基的总数; h_i 是第 i 个残基的 Nozaki-Tanford-Jones 疏水性指数。

H_i 的算术平均值 $\langle H \rangle$ 反映出残基所选择的疏水性环境,即“体积疏水特性”。20 种氨基酸的 $\langle H \rangle$ 值见表 3。根据表 3 把氨基酸残基分成三类。

疏水性: ($\langle H \rangle > 13.50$): Val. Ile. Leu. Cys. Met. Phe. Trp.

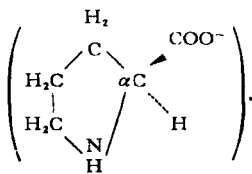
中 性: ($12.00 < \langle H \rangle < 13.50$) Tyr. Ala. Gly. His.

亲水性: ($\langle H \rangle < 12.00$): Glu. Gln. Arg. Thr. Asn. Pro. Lys. Ser. Asp.

表 3 氨基酸的平均围绕疏水性标度 $\langle H \rangle$

氨基酸	$\langle H \rangle$ (Kcal/mol)	氨基酸	$\langle H \rangle$ (Kcal/mol)
Val	15.71	His	12.16
Ile	15.67	Glu	11.89
Leu	14.90	Gln	11.76
Cys	14.63	Arg	11.72
Met	14.39	Thr	11.62
Phe	14.00	Asn	11.42
Trp	13.93	Pro	11.37
Tyr	13.42	Lys	11.36
Ala	12.97	Ser	11.23
Gly	12.43	Asp	10.85

从表 3 来看, Val 和 Ile 的围绕疏水性最大。而根据 Tanford 定义的热力学转化值, Val 的非极性小于 Ile. Phe 和 Trp. Trp 和 Tyr 的 $\langle H \rangle$ 较低表明, 即使一个很大的非极性侧链, 其中有一个极性原子疏水环境就大大降低。注意此标度中 Pro 的平均疏水值落在极性基团的 $\langle H \rangle$ 值范围。原因是: 脯氨酸虽也是脂肪烃侧链, 但它是一种 α -亚氨基酸



α 碳原子参与 R 基吡咯的形成, 环内的 C_{α} -

N 键和 C-N 肽键都不能旋转, 且肽键不具亚氨基, 不能形成链内氢键。限制了形成 α 螺旋体, 只能留在表面。因此, 降低了围绕疏水性。表 3 还可看出, Gln. Glu 和 Arg 是极性基团中疏水性较大的, 带电荷的 Asp 残基疏水性最低。

4. Nazaki Tanford^[6] 和 Jones^[7] 的疏水性指数

测定了氨基酸、二甘肽链和三甘肽链在水溶液、乙醇和二噁烷溶液中的溶解度, 计算出氨基酸侧链和肽链从水到二噁烷中的自由能转化值。结果表明乙醇和二噁烷对氨基酸等的溶解度相似, 其自由能转化值也基本相等。用疏水侧链到 100% 乙醇和二噁烷溶液中自由能的转化值(见表 4)建立了一种氨基酸的疏水性标度。

根据表 4, 把氨基酸分成:

疏水性: Trp. Ile. Phe. Pro. Tyr. Leu. Val. Met Lys. Cys.

亲水性: Ala. His. Arg. Glu. Asp. Gly. Asn. Ser. Thr. Gln.

该标度只考虑孤立氨基酸从水相转入有机相的自由能变化值, 常不能反映蛋白质分子中氨基酸残基真实的疏水性。例如表 4 中 Tyr 的疏水性很高, 并不能肯定在蛋白质中 Tyr 易被埋入。Pro 的高疏水性也不能说明 Pro 容易进入蛋白质内部, 实际上 Pro 容易处于分子表层。

表 4 氨基酸的自由能转化值

氨基酸	自由能转化值 (Kcal/mol)	氨基酸	自由能转化值 (Kcal/mol)
Trp	3.77	Ala	0.87
Ile	3.15	His	0.87
Phe	2.87	Arg	0.85
Pro	2.77	Glu	0.67
Tyr	2.67	Asp	0.66
Leu	2.17	Gly	0.10
Val	1.87	Asn	0.09
Met	1.67	Ser	0.09
Lys	1.64	Thr	0.07
Cys	1.52	Gln	0.00

5. Wertz 和 Scheraga^[10] 的疏水性标度

定义蛋白质每一种残基埋在分子内部的分

数: $P_{in} = \frac{\text{埋在分子内部残基的数目}}{\text{残基总数}}$

计算 20 种蛋白质的 P_{in} 值, 列表 5。

平均埋入分数 $\bar{P}_{in} = 0.57$ 。

表 5 中非极性残基 Ala 和 Pro 的 P_{in} 值小于 0.57, 可能是因为 Ala 的甲基侧链比较小, 与两个使 Ala 残基和其它多肽键相连的极性肽链相比, 非极性不足以使 Ala 残基优先进入内部, 净效果是 Ala 在分子内部和外部的比例相仿。

Pro 的吡咯环虽有四个非极性的亚甲基, 却有出现在蛋白质分子表层的强烈倾向。(仅 Lys 比 Pro 强) 这是与实验事实相吻合的: 吡咯与水混溶^[4], 聚脯氨酸是水溶性最好的多聚氨基酸之一^[5], 结晶态的聚脯氨酸对水有强烈的亲和作用^[6]。故 Pro 残基的疏水作用与表 5 所示顺序一致。

表 5 氨基酸的埋入分数

氨基酸	埋入分数	氨基酸	埋入分数
Phe	0.87	Ser	0.49
Trp	0.86	Arg	0.49
Cys	0.83	Asn	0.42
Ile	0.79	Gly	0.41
Leu	0.77	Thr	0.38
Met	0.76	Glu	0.38
Val	0.72	Asp	0.37
His	0.70	Pro	0.35
Tyr	0.64	Glu	0.35
Ala	0.52	Lys	0.31

Cys 易于埋入分子内部可以这样解释: 在蛋白质中几乎所有 Cys 残基都以胱氨酸的形式存在。胱氨酸带有两个微极性的二硫键在多肽链的二部分间作桥梁作用, 避免了与水接触, 这样极性多大, 都不起作用。

Lys 的结构是, 在一个较大非极性侧链的端头有一个极性基团, 但是在表 5 中, Lys 的埋入分数 P_{in} 最低, 表示最偏于分子外部, 即 Lys 的全部侧链(不仅极性部分)一般都处在蛋白质分子外部。原因认为是与每个 Lys 的主干构象相应有许多能量相近的侧链构象^[4]。

6. chothia^[12] 的标度

该种标度是计算 12 种蛋白质样品中的氨基酸埋入分子内部 95% (指残基中可与溶剂接

触的原子的可装配面积小于整个残基的 5%) 的氨基酸分数建立起来的。数据见表 6。根据表 6 残基分成两类:

极性: Ile. Val. Phe. Cys. Leu. Met. Ala. Gly;

非极性: Trp. Thr. Ser. Glu. Pro. His. Asp. Tyr. Asn. Gln. Lys. Arg.

埋在分子内部残基的百分数与侧链之极性成反比。非极性残基埋入 95% 以上表面的比例是 0.44; 带有一个极性侧链原子的残基埋入 95% 以上装配面积的比例是 0.22; 带有二个极性侧链原子的残基的相应值是 0.11。整体平均值是 0.28。与 Wertz. Scheraga 标度的 $\bar{P}_{in} = 0.57$ 相比, 该标度的疏水性条件严格(考虑 12 种蛋白质中几乎完全不与溶剂接触的某一残基百分数)。但这种定义法能把某些与水(溶剂)接触很少的残基也认为是存在于分子外面。在表 5 和表 6 中, Trp. His. Tyr. Arg 和 Gly 的相互位置差较大。一种可能的原因是各自采用的蛋白质样品的数量和种类不同, 但主要原因是两种方法所定义的蛋白质表面不同^[10]。

表 6 氨基酸的 95% 埋入的分数

氨基酸	95%埋入的分数	氨基酸	95%埋入的分数
Ile	0.60	Ser	0.22
Val	0.54	Glu	0.18
Phe	0.50	Pro	0.18
Cys	0.50	His	0.17
Leu	0.45	Asp	0.15
Met	0.40	Tyr	0.15
$\frac{1}{2}$ Cys	0.40	Asn	0.12
Ala	0.38	Gln	0.07
Gly	0.36	Lys	0.03
Trp	0.27	Arg	0.01
Thr	0.23		

7. Komoriya 和 Krigbaum^[12] 的侧链相互作用参量 ξ

设一个肽键单元从乙醇转入水中侧链的自由能变化为 ΔG_{EW}^i

$$\begin{aligned}\Delta G_{EW}^i &= V_i[(\xi_i - \xi_w)^2 - (\xi_i - \xi_E)^2] \\ &= V_i[(\xi_w + \xi_E) - 2\xi_i](\xi_w - \xi_E)\end{aligned}$$

其中, V_i 是侧链 i 的摩尔体积. ξ_i 、 ξ_w 、 ξ_E 分别代表侧链、水、乙醇的相互作用参量. ($\xi_w + \xi_E$) 可任意指定, 因其只改变标度的零点而不影响 ξ 参数的差值. 通过实验求出自由能转化值代入上述公式可算出侧链的相互作用参数 ξ_i . 见表 7. 根据表 7, 把氨基酸分成三类:

表 7 氨基酸的侧链相互作用参数 ξ_i

氨基酸	ξ_i^*	氨基酸	ξ_i^*
Cys	1.73	Ser	5.37
Ile	2.31	His	5.66
Met	2.44	Asp	6.04
Phe	2.59	Gly	6.09
Trp	2.78	Gln	6.13
Val	3.31	Glu	6.17
Tyr	3.58	Asn	6.24
Leu	3.93	Arg	6.55
Ala	4.32	Pro	7.19
Thr	5.16	Lys	7.92

* 23 种蛋白质 (4170 个残基) 的

疏水性: Cys. Ile. Met. Phe. Trp. Val. Tyr

中 性: Leu. Ala. Thr. Ser.

亲水性: His. Asp. Gly. Gln. Glu. Asn.

Arg. Pro. Lys.

又, 根据自由能转化值以及相近水分子的分
数, 确定 20 种氨基酸的极性和顺序为:

非极性: Ile. Cys. Met. Phe. Leu. Val. Trp.
Tyr.

中 性: Ala. Thr. His. Ser. Gln. Asp.
Glu.

极 性: Asn. Arg. Pro. Lys.

由上也可以说明, 疏水性和极性是有区别的, 不能简单地将二者等同起来.

结 语

蛋白质分子的各种生物功能与其复杂的结构密切相关, 而疏水基的相互作用是维持蛋白质天然构象的重要因素 (此外还有氢键力、静电力、范德华力等因素). 因此, 有必要进行蛋白质分子中氨基酸残基的疏水性研究.

参 考 文 献

- [1] 沈同等著:《生物化学》.
- [2] Nebergall, W. H.: *General Chemistry*.
- [3] Meirovitch, H., Rackovsky, S. and Scheraga, H. A.: *Macromolecules*, **13**, 1398—1405, 1980.
- [4] Zimmerman, S. S. et al.: *Nature (London)*, **275**, 673, 1978.
- [5] Lee, B., Richards, F. M.: *J. Mol. Biol.*, **55**, 379, 1971.
- [6] Nozaki, Y., Tanford, C.: *J. Biol. Chem.*, **246**, 2211, 1971.
- [7] Jones, D. D.: *J. Theor. Biol.*, **50**, 167, 1975.
- [8] Rachovsky, S., Scheraga, H. A.: *Proc. Natl. Acad. Sci. U. S. A.*, **74**, 5248, 1977.
- [9] Manavalan, P., Ponnuswamy, P. K.: *Nature (London)*, **275**, 673, 1978.
- [10] Wertz, D. H., Scheraga, H. A.: *Macromolecules*, **11**, 9, 1978.
- [11] Chothia, C.: *J. Mol. Biol.*, **105**, 1, 1976.
- [12] Krigbaum, W. R., Komoriya, A.: *Biochim. Biophys. Acta*, **576**, 204, 1979.
- [13] Krigbaum, W. R., Rubin, B. H.: *Biochim. Biophys. Acta*, **229**, 368, 1971.
- [14] Pictet, A., Court, G.: *Chem. Biol.*, **40**, 3771, 1907.
- [15] Berger, A. et al.: *Chem. Soc.*, **76**, 5552, 1954.
- [16] Kuntz, I. D.: *J. Am. Chem. Soc.*, **93**, 514, 1971.

[本文于 1984 年 3 月 30 日收到]

(上接第 46 页)

4. 在能分离、辨认的范围内, 样品量越少, 电泳后的谱带越清晰. 如样品用量过大, 就出现扩散或扭曲现象 (图 2 (见封 3)).

5. 决定 SDS-聚丙烯酰胺凝胶电泳分离效果主要是分子筛效应, 其次是电荷效应, 因此必须在恒压下进行电泳. 随意改变电压必然破坏分子筛效应, 影响分离效果 (图 4 (见封 3)).

6. 由于电泳过程中电压很高, 凝胶板的温度明显上升, 致使凝胶变软, 变形, 造成孔径的不均一, 影响分离结果 (图 5 (见封 3)), 为此必须具备一个良好的冷却系统. 如没有这套设备, 根据我们的经验, 用一台电风

扇代替也能达到冷却目的.

7. 灌胶时的速度最好控制在 20—30 分钟, 如果速度太快, 形成梯度不均匀, 出现的谱带不清晰, 重影并有拖尾现象 (图 6 (见封 3)).

8. 梳子厚度与凝胶厚度要匹配. 如梳子太薄, 样品加入时会外溢, 结果见图 7 (见封 3).

9. 电泳槽玻璃板的选择也十分重要. 玻板表面不光滑, 周边不平, 密封不严, 就可能造成电流短路.

10. 图 8 (见封 3) 是防止上述种种异常现象后得到的一个较好的谱带.

本工作承于秉治老师和王殿鸿副教授指导, 特此致谢.

[本文于 1985 年 2 月 5 日收到]