

经验交流

用微机软件计算金属离子与络合剂间相互作用的数量关系

程 刚 孙 大 业

(河北师范大学生物化学系, 石家庄 050016)

关键词 微机软件, 复杂络合平衡系统, 金属离子, 络合剂

在现代生物化学及分析化学领域中, 经常遇到有关金属离子与络合剂间络合反应平衡的计算。当反应体系中有多种金属离子及络合剂存在时, 这种计算就变得非常复杂, 必须借助于计算机才能完成。Wolf^[1] 1973 年提出了由一种络合剂及两种金属离子构成的络合平衡体系中, 各成分间数量关系的计算公式。谢宝田等^[2]曾将此公式进行了转换, 简化并设计了微机程序, 但仍不能满足经常要遇到的有两种以上的金属离子及络合剂同时参加的复杂体系的计算。

最近, 我们从国外引进了一个微机应用软件: “复杂络合平衡系统” 1990 年 4.1 版 (MAX CHELATOR V4.1 1990)。它是美国 Stanford 大学的 Patton 先生根据 Fabiato 等^[3]的原始程序作了进一步完善扩充开发出的最新版本, 可用于多种金属离子 (最多可达五种) 及络合剂 (最多三种) 同时参加的络合平衡体系中复杂数量关系的计算。

该软件的主要功能可分为以下三项:

一. 计算 软件可进行下列三种类型的计算, 在程序运行时由用户选择其中之一。

1. 由已知络合剂浓度及所需得到的自由金属离子浓度, 计算溶液中应加入的金属离子的总浓度。

2. 由已知络合剂浓度及金属离子总浓度, 计算溶

液中未被络合的自由金属离子的浓度。

3. 由已知金属离子总浓度及所需得到的自由金属离子浓度, 计算溶液中应加入的络合剂的浓度。

二. 参数的编辑与修改 对于计算需要的络合剂解离常数, 络合物的形成常数等有关参数, 程序运行时可以进行编辑与修改。此功能分为两类:

1. 人工编辑修改: 软件提供了七种络合剂及九种金属离子间的有关参数。表 1 列出了其中一部分。当需要对其中某些参数进行修改或需要输入新的络合物的有关参数时, 可调用此功能进行编辑修改后输入贮存到软件中。

2. 自动调整: 贮存在软件中的参数都是在温度 20°C, 离子强度 $I = 0.1 \text{ mol/L}$ 条件下的。当要计算的络合平衡状态与此不一致时, 软件可按照新的状态自动调整有关参数, 然后才开始计算, 以得到准确的结果。参数调整的原理基于 Harrison 和 Bers^[4] 1989 年的工作。

三. 存贮与打印记录 所有的计算类型, 平衡状态条件、计算内容及结果, 都可以十分方便地在磁盘上进行存取。也可以接通打印机将屏幕上所显示的内容打印记录下来。

软件在 IBM PC/XT 或其兼容机上运行, 需用磁

表 1 部分络合物形成常数的对数值 ($\lg K_{\text{形}}$)^{*}

	Cu ²⁺		Al ³⁺		Zn ²⁺		Fe ²⁺		Ca ²⁺		Mg ²⁺		Ba ²⁺	
EGTA	17.71	4.36	14.45	4.51	12.70	4.96	11.87	4.30	10.97	3.79	5.21	3.37	8.41	5.31
EDTA	18.80	3.00	16.30	2.50	16.50	3.00	14.32	2.75	10.69	3.18	8.79	3.85	7.86	4.57
HEDTA	8.30	0.00	14.30	0.00	14.70	0.00	12.30	2.70	8.30	0.00	7.00	0.00	6.30	0.00
EEDTA	18.10	4.20			15.30	2.75	14.30	3.40	10.05	4.29	8.32	4.95	8.15	5.17
DETPA	21.55	4.70	18.60	4.63	18.40	5.43	16.50	5.35	10.83	6.11	9.30	7.09	8.87	5.55
ATP	6.14	3.52			4.85	4.35			3.77	4.69	4.06	4.55	3.29	5.10

^{*} EGTA: 乙二醇二乙醚二胺四乙酸 EDTA: 乙二胺四乙酸 HEDTA: 乙二胺羟乙基三乙酸 EEDTA: 二乙醚二胺四乙酸 DETPA: 三乙胺五乙酸 ATP: 三磷酸腺苷 温度 20°C 离子强度 $I = 0.1 \text{ mol/L}$ 。

盘操作系统 DOS 3.0 以上版支持。采用人机对话形式,操作简便。彩色显示清晰醒目。软件的部分程序来自 Newlin^[5] 1988 年的工作。

我们利用该软件进行了多种计算。如用于植物组织和细胞培养的 MS (Murarhige 和 Skoog^[6]) 液体培养基中各种金属离子实际自由离子浓度的计算。为了配制含有一定浓度的相对稳定的自由金属离子的培养基。可加入一定浓度的络合剂构成络合平衡缓冲系统。由表 2 可以看出由于原 MS 培养基中加有 1×10^{-4}

mol/L 的络合剂 EDTA 使溶液中铜、锌、钴、锰的实际自由离子浓度降低比较大,而对钙离子则影响较小。为了控制溶液中的自由钙离子浓度,可加入另一种对钙离子络合能力较强的络合剂 EGTA 1×10^{-3} mol/L。由于更高浓度的络合剂可能会对细胞活力产生影响,所以配制含较低自由钙离子浓度的培养基时,需改变加入的钙离子总浓度。用软件可以计算出这种含有五种金属离子及两种络合剂的络合平衡体系中,为获得含自由钙离子浓度从 1×10^{-2} 到 1×10^{-6} mol/L 的 MS

表 2 络合剂对 MS 液体培养基中自由金属离子浓度 (mol/L) 的影响*

金属离子及其总浓度 金属离子自由离子浓度 络合剂及其总浓度	[Cu ²⁺]	[Zn ²⁺]	[Co ²⁺]	[Mn ²⁺]	[Ca ²⁺]
	1.0×10^{-7}	3.0×10^{-5}	1.0×10^{-7}	1.0×10^{-4}	3.0×10^{-3}
[EDTA] 1×10^{-4}	3.57×10^{-13}	2.36×10^{-8}	1.32×10^{-10}	2.23×10^{-5}	2.91×10^{-3}
[EDTA] 1×10^{-4} [EGTA] 1×10^{-3}	2.94×10^{-14}	6.13×10^{-9}	3.17×10^{-11}	4.50×10^{-6}	2.06×10^{-3}

* pH = 5.8 温度 27℃ 离子强度 $I = 0.056$ mol/L。

表 3 用 EDTA, EGTA 配制含不同自由钙离子浓度 (mol/L) 的 MS 培养基*

所需自由钙离子浓度	1.00×10^{-2}	1.00×10^{-3}	1.00×10^{-4}	1.01×10^{-5}	1.01×10^{-6}
应加入的钙离子总浓度	1.10×10^{-2}	1.92×10^{-3}	6.86×10^{-4}	1.40×10^{-4}	1.58×10^{-5}

* pH = 5.8 温度 27℃ 离子强度 $I = 0.056$ mol/L EDTA, EGTA 及 Cu²⁺, Zn²⁺, Co²⁺, Mn²⁺ 的总浓度同表 2。

培养基,应加入的钙离子总浓度。计算结果列于表 3。我们用此结果配制了培养基,用于研究钙离子对培养细胞生长的影响。

另外,我们还对 Wolf^[1] 的数据进行了重新计算,得到了非常相近的结果。

该软件用途广泛,适于所有与络合反应有关的体系。尤其是对于有多种络合剂及金属离子同时参加的复杂体系,使用该软件可以非常方便地进行计算。

我室在美国进修的郭艳林同志提供软件的最初版,谨此致谢。

参 考 文 献

1 Wolf H U. *Experientia*, 1973; 29: 241
2 谢宝田等,生物化学与生物物理进展,1989;16(6):476
3 Fabiato A *et al.*, *J Physiol Paris*, 1979;75 463
4 Herrison S M, Bers D M. *Am J Physiol*, 1989; 256: C 1250
5 Newlin J J. *Programmer's J*, 1988; 6 (4): 66
6 Murarhige T, Skoog F. *Physiologia PL*, 1962; 15: 473

[本文于1989年11月25日收到,1990年6月4日修回]

(上接第 131 页)

力下降,而 apoCII 和 HDL 能拮抗 LDL 这一作用,并能通过刺激 EC 微粒体的 PGI₂ 合成酶使 PGI₂ 合成量增加。apoCII 的作用比 HDL 稍弱。

综上所述,apoCII 可以拮抗 LDL 对 EC 的损伤作用,提示 apoCII 与 HDL 一样,也具有抗 AS 作用。本实验为 AS 的防治研究提供了新的线索。

[本文于 1990 年 11 月 27 日收到,12 月 8 日修回]