

## 多肽和蛋白质酰胺-I带振动频率图的温度依赖性

### Temperature-Dependence of the Amide-I Frequency Map for Peptides and Proteins

摘要点击 220 全文点击 87 投稿时间: 2011-7-28 采用时间: 2011-9-27

[查看全文](#) [查看/发表评论](#) [下载PDF阅读器](#)

doi: 10.1088/1674-0068/24/05/529-537

中文关键词 [酰胺带-I](#) [频率图](#) [红外光谱](#) [分子动力学模拟](#)

英文关键词 [Amide-I](#) [Frequency map](#) [Infrared spectrum](#) [Molecular dynamics simulation](#)

基金项目

作者	单位	E-mail
韩晨	<a href="#">中国科学院化学研究所分子反应动力学国家重点实验室, 北京分子科学国家实验室, 北京100190</a>	
王建平*	<a href="#">中国科学院化学研究所分子反应动力学国家重点实验室, 北京分子科学国家实验室, 北京100190</a>	jwang@iccas.ac.cn

中文摘要

利用高温分子动力学模拟和红外光谱实验手段, 研究了一个基于分子力学力场的酰胺-I带振动频率图的温度依赖性. 结果表明, 基于298 K所建立的频率图可以应用上至500 K的分子动力学轨迹, 所模拟的红外光谱能够很好地重复88 oC时的实验光谱. 另外还模拟了两个含有天然和非天然氨基酸残基的三肽分子的红外光谱, 与实验结果相比得到了较好的符合. 结果表明, 所建立的频率图能够用于获得多肽体系在不同温度下的酰胺-I带局域模振动频率及其分布, 有助于深入认识多肽的热去折叠物种的红外光谱特征.

英文摘要

In our recent work [Phys. Chem. Chem. Phys. 11, 9149 (2009)], a molecular-mechanics force field-based amide-I vibration frequency map (MM-map) for peptides and proteins was constructed. In this work, the temperature dependence of the MM-map is examined based on high-temperature molecular dynamics simulations and infrared (IR) experiments. It is shown that the 298-K map works for up to 500-K molecular dynamics trajectories, which reasonably reproduces the 88 oC experimental IR results. Linear IR spectra are also simulated for two tripeptides containing natural and unnatural amino acid residues, and the results are in reasonable agreement with experiment. The results suggest the MM-map can be used to obtain the temperature-dependent amide-I local mode frequencies and their distributions for peptide oligomers, which is useful in particular for understanding the IR signatures of the thermally unfolded species.

Copyright©2007 IOPP

承办: 中国科学技术大学 协办: 中国科学院大连化学物理研究所  
主管: 中国科学技术协会 主办: 中国物理学会 国际代理发行: 英国物理学会

编辑部地址: 安徽省合肥市金寨路96号 中国科学技术大学东区外语楼二楼  
联系电话: 0551-3601122 Email: [cjcp@ustc.edu.cn](mailto:cjcp@ustc.edu.cn)

本系统由北京勤云科技发展有限公司设计