

蛋白质构型变化的二维广义郎之万方程描述

Protein Conformational Change Based on a Two-dimensional Generalized Langevin Equation

摘要点击 229 全文点击 108 投稿时间: 2011-9-2 采用时间: 2011-9-23

[查看全文](#) [查看/发表评论](#) [下载PDF阅读器](#)

doi: 10.1088/1674-0068/24/05/597-603

中文关键词 [蛋白质构型涨落](#) [二维广义郎之万方程](#) [原子密度填充模型](#) [高斯分数噪声](#)

英文关键词 [Protein conformational fluctuation](#) [Two-dimensional generalized Langevin equation](#) [Atomic packing density model](#) [Fractional Gaussian noise](#)

基金项目

作者	单位	E-mail
王莹希	四川大学化学学院, 成都610064	
林广双木	四川大学化学学院, 成都610064	
赵南蓉*	四川大学化学学院, 成都610064	zhaonanr@scu.edu.cn
严以京	香港科技大学化学系, 九龙; 中国科技大学合肥微尺度物质科学国家重点实验室, 合肥230026	

中文摘要

采用二维广义郎之万方程描述蛋白质构型的随机变化, 并与电子输运过程的原子密度填充模型相协调. 假设通过键和通过空间的两类电子输运路径分别受到高斯分数噪声和高斯白噪声的影响. 推导了电子转移给体-受体距离涨落和荧光寿命涨落自相关函数的一般表达式. 采用数值拉普拉斯反变换计算了蛋白质构型涨落动力学, 并详尽讨论了长时间和短时间行为的渐近解析. 最后, 明确了基于二维广义郎之万方程的蛋白质构型描述与一维描述之间的关系.

英文摘要

A two-dimensional generalized Langevin equation is proposed to describe the protein conformational change, compatible to the electron transfer process governed by atomic packing density model. We assume a fractional Gaussian noise and a white noise through bond and through space coordinates respectively, and introduce the coupling effect coming from both fluctuations and equilibrium variances. The general expressions for autocorrelation functions of distance fluctuation and fluorescence lifetime variation are derived, based on which the exact conformational change dynamics can be evaluated with the aid of numerical Laplace inversion technique. We explicitly elaborate the short time and long time approximations. The relationship between the two-dimensional description and the one-dimensional theory is also discussed.

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

本系统由北京勤云科技发展有限公司设计