

不同螺旋结构类蛋白质分子管道传输动力学研究*

孙婷婷^{1**} 姜舟婷²

(¹ 浙江工商大学信息与电子工程学院 杭州 310018)

(² 中国计量学院理学院 杭州 310018)

摘 要 采用动态蒙特卡洛模拟(Dynamical Monte Carlo, DMC)对不同螺旋结构的类蛋白质分子穿越管道的动力学过程进行了研究. 计算了不同螺旋能参数下类蛋白质链的传输时间, 传输成功率, 管道内单体数目 $\langle n_{in} \rangle$, 形状因子 $\langle \delta \rangle$, 均方位移 g 等. 结果发现螺旋能较小的链传输时间较短, 变化不明显, 而螺旋能较大的链随着螺旋能的增强传输时间迅速增大. 计算表明相同类型的分子链其传输成功率随着电场的增大而减小. 而对于不同螺旋结构的链, 螺旋能参数 $\varepsilon_h = 0$ 的链传输成功率最大, 达到 80% 左右, 略小于自避链; 而 $\varepsilon_h = -0.5$ 的类蛋白质链传输成功率突然减小. 随着螺旋能的增强, 传输成功率又开始增大. 另外 $\langle n_{in} \rangle$ 的计算表明自避链的传输过程比类蛋白质链平稳. $\langle \delta \rangle$ 在传输过程中的变化都存在了最大值, 说明链在传输时有一个最松散的构象. 对于均方位移的计算得到 $\varepsilon_h = 0$ 的链均方位移变化最快, 说明传输过程中扩散最快. 同时发现 $\varepsilon_h = -3.0$ 的链比 $\varepsilon_h = -1.5$ 的链均方位移扩散快. 形状因子和均方位移的趋势均能很好的解释不同螺旋参数下的类蛋白质链不同的传输性质. 这些研究对生物大分子的输运行为有一定的指导意义.

关键词 动态蒙特卡洛(DMC), 类蛋白质分子, 螺旋结构

蛋白质等生物大分子在纳米通道中的传输过程在生物体中具有重要意义^[1]. 比如蛋白质分子传输通过细胞膜以及内质网^[2], 基因在细菌之间的交换^[3], RNA 在核通道传输^[4]等均属于此类现象. 除此之外, 像基因传输^[5]以及 DNA 测序这些生物技术应用也涉及到传输过程. 蛋白质进入或穿过细胞膜需要能量. 很多时候, 能量来源于跨膜电化学电位, 或者来源于在传输过程之中或之后发生的蛋白质折叠^[6,7]. 尽管这些关于蛋白质传输的生化机制已有很大的研究进展, 但是蛋白质传输的物理机制仍然比较模糊.

真实的生物体系非常复杂, 因此人们在讨论蛋白质传输的基本物理过程时, 往往采用一条高分子链穿越小孔(或者通道)来模拟蛋白质的传输过程. 这个科学问题在理论和模拟方面都有比较详细的研究^[8~17]. 理论方面有代表性的是 Sung 和 Park 通过单体迁移概率分布函数 Fokker-Planck 方程研究高分子的传输过程^[8]. Muthukumar 运用经典成核理论研究传输过程^[9]. 模拟方面, 一个共性的研究问题就是传输时间和

链长的标度关系 $\tau \sim N^\alpha$, 指数 α 满足 $2\nu < \alpha < 1 + \nu$. 对于三维和二维, $\nu = 0.588$ 和 0.75 . 罗开富等曾运用蒙特卡洛方法^[10]和分子动力学方法^[11]研究了高分子传输过程中的标度行为, 还研究了高分子和小孔的相互作用对传输时间分布的影响^[12]. 同时 Dubbelda 等^[13]以及 Lzmitli 等^[14]分别研究了化学势能下以及流场作用下的时间标度. 除此, 还有其他一些研究表明温度, 通道大小, 形状等都会对传输过程产生影响^[15~17].

在之前的研究中, 更多的焦点聚集于高分子链的管道穿越过程. 而蛋白质的传输过程的研究并不多. 然而蛋白质链的传输过程的研究更有现实意义. 蛋白质是紧密高分子^[18], 蛋白质内部有很多类型的相互作用, 并且在蛋白质的折叠和结构的稳定性中起到重要作用. 最简单的基于格点的紧密高分子模型只考虑了紧密接触对相互作用. 为了更合理的表示蛋白质, 本文所采用的修正的 ODI 模型虽然也是基于格点模型, 但在引入紧密接触对的作用时, 同时引入了螺旋和折叠等二级结构. 因此本文运用修正的 ODI 模型以及动态

* 2012-11-15 收稿, 2013-01-31 修稿; 国家自然科学基金(基金号 20904047, 21204078)、浙江省自然科学基金(基金号 LY12B04003, Y6110304)和浙江省科技厅钱江人才项目(项目号 2010R10022).

** 通讯联系人, E-mail: tingtingsun@mail.zjgsu.edu.cn

doi:10.3724/SP.J.1105.2013.12370

蒙特卡罗方法 (DMC) 对不同螺旋结构的类蛋白质分子穿越圆柱形管道过程中的构象极其动力学行为进行了详细的讨论.

1 计算方法

本文所采用的模型是基于 Zhdanov 和 Kasemo 所提出的 ODI (orientation-dependent monomer-monomer interactions) 模型^[19] 的改进. 在此模型中, 类蛋白质分子链的原子位于三维的立方格点上, 链上相邻的原子在立方格点上是最邻近的, 并且每个格点只能被一个单体所占据. 作者曾应用此模型研究了类蛋白质分子的构象, 折叠以及拉伸行为^[20~24]. 此模型同时考虑了蛋白质的二级结构, 包括 α 螺旋、 β 折叠以及紧密接触对. 考虑蛋白质分子的二级结构以及表面吸附情况, 类蛋白质分子的能量由 5 个部分构成, 即

$$E = \sum_{|i-j|\geq 3} \varepsilon_c \delta(r_{ij} - a) + \sum_{|i-j|\geq 3} \varepsilon_b \delta(r_{ij} - a) + \sum_{i=1}^{N-1} \omega(\vec{s}_i \vec{s}_{i+1}) + \varepsilon_h N_h \quad (1)$$

其中 r_{ij} 是单体 i 和 j 之间的距离. a 是格子的间距 (实际上, 在我们的计算中 $a = 1$). 当 $x = 0$, $\delta(x) = 1$; 当 $x \neq 0$, $\delta(x) = 0$. 单位矢量 $\vec{s}_i$ 代表单体的侧基方向, $(\vec{s}_i \vec{s}_{i+1})$ 是方向矢量的标量积. 这里等式 (1) 的第一项代表了紧密接触对的相互作用能量. 第二项中的 ε_b 对应类蛋白质分子的氢键相互作用能量. 考虑到氢键形成的必要条件, 认为要存在 ε_b 值必须同时满足以下两个条件: (1) 单体 i 和另一个单体 j 满足条件 $\vec{r}_i + \vec{s}_i = \vec{r}_j$, (2) 同时矢量 $\vec{s}_i$ 和 $\vec{s}_j$ 必须是平行的. 其他情况下 $\varepsilon_b = 0$. 因此这里的第二项是 β 折叠相互作用能量. 第三项 ($\omega > 0$) 描述了类蛋白质链上相邻单体的相互作用能对方向性的依赖. 其目的是为产生一个相邻单体反方向提供能量. 第四项中, ε_h 表示形成一个螺旋的能量, N_h 是螺旋的总个数, 因此 $\varepsilon_h N_h$ 就表示了类蛋白质分子内的螺旋的总能量. 在模拟中, 我们取 $\varepsilon_c = -0.5$, $\varepsilon_b = -0.5$, $\omega = 0.5$.

图 1 给出的是类蛋白质链穿出管道过程的示意图. 其中管道长度 $L = 5$, 管道半径 $R = 5$, 链长 $N = 100$. 同时定义了传输过程中穿出管道的单体数目为管道外单体数用 s 表示. 驱动链穿出管道的驱动力是管道内的电场 E . 势能表达为^[25]:

$$U_e = \begin{cases} 0, & z < 0 \\ -Ez, & 0 \leq z \leq L \text{ and } x^2 + y^2 \leq R^2 \\ -EL, & z > L \\ \infty, & \text{otherwise} \end{cases} \quad (2)$$

本文中的所有能量都是以 $k_B T$ 为单位. 采用的模拟方法是动态蒙特卡洛方法研究蛋白质链的动态传输过程^[26]. 不同螺旋能参数 ε_h 代表不同螺旋结构的蛋白质. 每个螺旋能参数 ε_h 绝对值越大, 总螺旋个数越多, 总能量越小. 因此为了讨论具有不同螺旋结构的蛋白质穿出管道的动力学变化, 我们计算了不同螺旋能参数 ε_h 下的类蛋白质分子穿出管道的动力学变化.

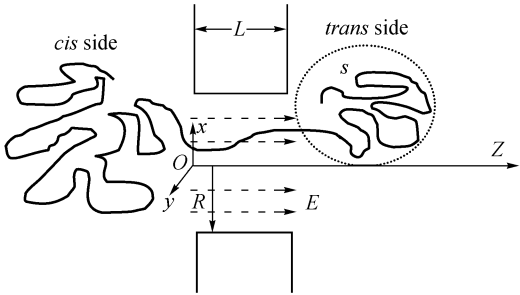


Fig. 1 Schematic representation of a protein molecule translocating through a cylindrical nanopore

模拟过程分为管道外的链平衡过程和链穿越管道的过程. 在穿越管道前, 我们先在管道外随机产生一条链, 其中第一个单体固定在管道入口, 按照经典的 Metropolis 方法, 随机选取一个单体进行运动, 如果新构象没有违反排斥体积效应, 则该新构象以 $[e^{-\Delta U/k_B T}, 1]$ 的最小值作为接受几率接受新构象^[27]. 模拟中时间的计量是以 Monte Carlo 步数 (MCS) 为单位, 一单位 MCS 定义为所有单体平均被选择一次所进行的尝试. 图 2 给出了某一次模拟过程中 $N = 100$, $\varepsilon_h = -1.5$ 的类蛋白质分子的体系能量随模拟时间的变化关系. 从图中可以发现, 刚开始, 体系能量迅速下降, 经过一段时间, 链在管道外达到了平衡, 我们选择 3×10^5 MCS 时的构象作为传输前的初始构象, 3×10^5 MCS 作为传输的起点. 文中所讨论的传输时间就是从该点开始计时. 当链在管外运动了 3×10^5 MCS, 释放固定的单体, 链就会在电场的作用下传输, 当所有的单体都穿出管道, 结束传输过程. 文中的结果是对 10000 次的模拟取的平均.

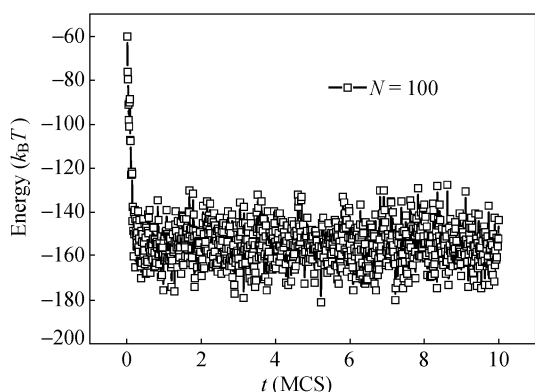
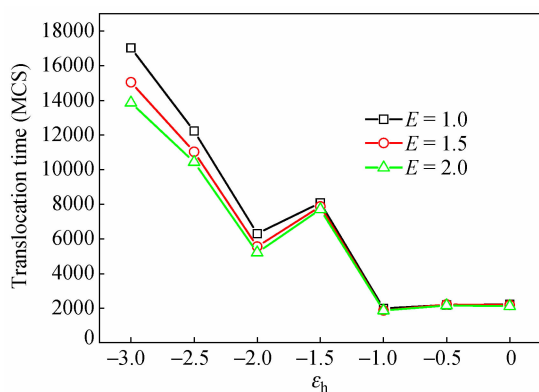


Fig. 2 Energy of protein before translocation versus time

Fig. 3 Translocation time versus helical parameter ε_h

2 计算结果和讨论

图3计算了传输时间和螺旋能参数 ε_h 之间的关系. 结果表明, 螺旋能较小的分子链传输时间较短. 对于螺旋能小的分子链来说, 传输过程中其构象减少引起的熵势垒比较小, 链容易调整构象, 形成细长的构象, 便于进入管道, 所以在进入管道的时候, 节省了时间. 再者, 链穿出管道时, 螺旋能小的分子链容易往各个方向调整自己的构象, 从而加快传输过程. 因此, 可以看到 $\varepsilon_h = 0$, -0.5 以及 -1.0 的传输时间在 2000 mcs 左右. 当 $\varepsilon_h = -1.5$, 传输时间增大到 8000 mcs 左右. 这是因为适当的螺旋能使分子链在传输前形成相对稳定的球形结构. 和螺旋能更低的分子链相比, 传输过程中的熵势垒比较大, 因此传输时间增大. 当 $\varepsilon_h = -2.0$, 传输时间降低为 6000 mcs 左右. 最后当 ε_h 继续增强, 传输时间开始增大. 这是由于链进入管道的熵阻力随着螺旋能的增强而增大. 另一方面, 分子链穿出管道的部分由于螺旋能的影响, 在链外会形成稳定的螺旋结构, 所以分子链调整构象也同时受到了局限, 两方面原因都会导致传输时间的增加.

另外, 还计算了不同大小的电场作用下, 不同程度螺旋的类蛋白质链的传输成功率与螺旋能参数 ε_h 的关系 (见图4). 研究表明, 螺旋能参数 $\varepsilon_h = 0$ 时, 蛋白质链穿出管道的成功率最高, 为 81%. 这是因为螺旋能参数为零的蛋白质链在传输时, 构象减少引起的熵阻力并不是很大, 因此传输成功率较高. $\varepsilon_h = -0.5$ 时, 成功率迅速减小为 37%. 这是由于该螺旋能对应的链结构在管道外特别稳定, 导致链进入管道时, 由于构象的减少, 引起的熵阻力增大很多, 因此成功率突然降低.

同时可以从传输前的形状因子看出链的稳定性. 图4中的小图是不同螺旋能参数对应的蛋白质链在传输前的形状因子 $\langle \delta \rangle$. 形状因子 $\langle \delta \rangle$ 趋于 0 代表链的构型趋于一个球形, $\langle \delta \rangle$ 趋于 1 代表链的构型趋于线形. 可以看到 $\varepsilon_h = 0$ 的链在传输前的形状因子为 0.622, 而 $\varepsilon_h = -0.5$ 的链的形状因子突然变为 0.245. 这说明 $\varepsilon_h = -0.5$ 的链在管道外是一个相当稳定的球形结构, 因此当有单体在电场作用下进入管道时, 熵阻力很大, 进入管道的单体很容易被管道外的单体拉回去, 导致传输失败, 因此成功率比 $\varepsilon_h = 0$ 要小的多. 对于 $\varepsilon_h = -1.0$, -1.5 , -2.0 和 -2.5 , 传输成功率分别是 41%, 58%, 73% 和 79%. 成功率的增大, 主要是由于螺旋能增强, 螺旋结构增多, 导致链的构象从球形到椭球形变化, 这对进入管道是有利的, 所以成功率增大. 而当 $\varepsilon_h = -3.0$ 时, 成功率又减小为 67%. 这是由于穿出管道的分子在链外形成的稳定结构不利于链调整自身的构象从而降低成功率. 另外还可以发现随着电场的增大, 传输成功率减小. 原因是电场增大, 链在管道内传输的速度比在管道外扩散的速度要大, 所以更容易造成出口处拥堵而导致传输失败. 最后计算了自回避链 (SAW chain) 传输的成功率, 均在 80% 以上, 这是由于自回避链结构比螺旋链松散, 传输过程造成被退回管道外和出口拥堵的几率变小, 因此成功率增大.

实际上, 分子链构象在传输过程中的变化的研究也是非常重要的. 因此, 我们研究了管道内平均单体数目 $\langle n_{in} \rangle$ 与管道外单体数 s 之间的关系, 如图5所示. 当螺旋能 $\varepsilon_h = 0$ 时, 链的头部进入管道导致的熵减小阻力不大, 管道内平均单体数目 $\langle n_{in} \rangle$ 基本保持不变直到 $s = 70$. 管道内单

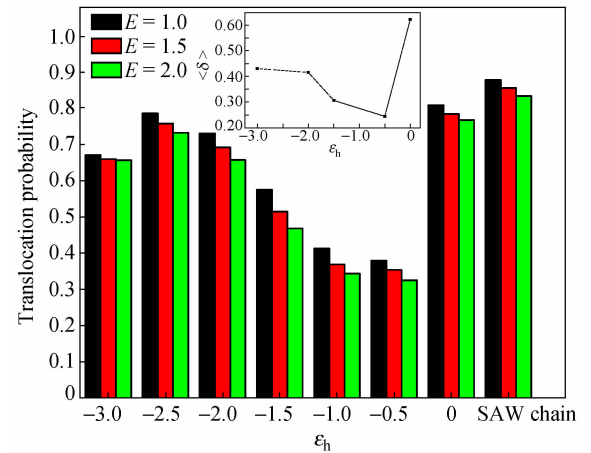


Fig. 4 Translocation probability versus helical parameter ε_h

体数目的不变说明整个传输过程是容易发生的,比较顺利的进行,传输的速度也比较平均.当 $s > 70$,管道外的单体造成了管道出口处的拥堵,导致了链必须在管道内调整构象,才能顺利的传输出去.因此管道内单体数目开始增大,传输速度减慢,在 $s = 87$ 左右,管道内单体数目具有最大值.我们可以认为这时构象调整到位.接着, $\langle n_{in} \rangle$ 开始下降,传输速度开始增大,最后全部离开管道.对于 $\varepsilon_h = -1.5$,和 $\varepsilon_h = -3.0$,在 $s < 70$ 都没有这么长的平台.这说明螺旋结构多的链,链必须不断的调整在管道内的构象,才能实现有效的传输.并且螺旋能越强,调整的越早,传输过程 $\langle n_{in} \rangle$ 变化的越不平稳.然而,所有曲线上都有峰值存在,并且随着螺旋能的增强,峰值向左偏移.说明螺旋能越强,调整到位对应的 s 也越小.显然,自回避链的 $\langle n_{in} \rangle$ 和螺旋链有着较大的区别.首先在 $s < 7$ 时, $\langle n_{in} \rangle$ 略微减小,当 $s > 7$, $\langle n_{in} \rangle$ 基本保持不变,直到 $s > 80$,出现了比较小的峰值,然后减小.自避链在传输过程中较长的平台不同于其他螺旋能强的类蛋白质链,说明了自避链的传输过程非常平稳,在传输过程中,传输速率变化不大,而螺旋能强的类蛋白质链则需要通过不断的调整自身在管道内的构象才能保证顺利的传输.

图6给出了形状因子 $\langle \delta \rangle$ 与链外单体数 s 之间的关系.结果表明,总体上,形状因子的变化存在着一个极大值.极大值的位置代表了链在传输过程中的最松散的构象.可以看到曲线最大值对应的 s 在40附近.另外,电场的大小对形状因子的影响不大.因此我们只讨论电场 $E = 1$,当 $s = 1$ 时,有一个单体离开管道时,对于 $\varepsilon_h = 0$, ε_h

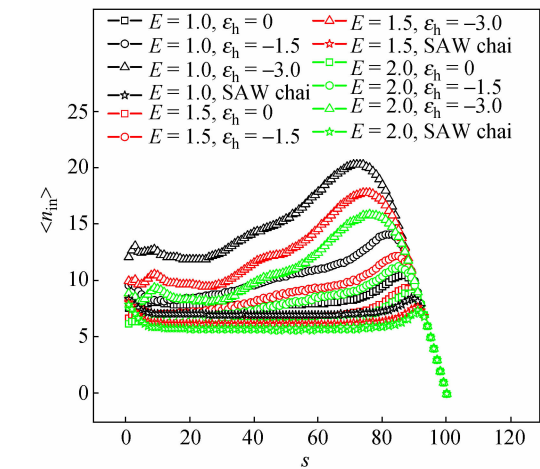


Fig. 5 Average number of monomers inside channel $\langle n_{in} \rangle$ in the process of translocation (s means the number of monomers translocated.)

$= -1.5$ 和 $\varepsilon_h = -3.0$, $\langle \delta \rangle$ 分别为0.62, 0.31, 0.43.可以看出,在刚开始进行穿越时, $\varepsilon_h = 0$ 的分子链已经形成相对比较直的一条链,为进一步的传输做好了充足的准备,因此传输较容易发生,传输时间也较短,和图3的结果吻合.当 $\varepsilon_h = -1.5$ 时,刚开始传输时,形状因子为0.24,说明形状和管道外稳定构象比较,改变的并不是很多,因此传输过程中必须不断调整构象,才能穿出管道.图4的结果也给出了 $\varepsilon_h = -1.5$ 的链传输成功率比 $\varepsilon_h = 0$ 时要低的多.而 $\varepsilon_h = -3.0$,形状因子介于中间,这是由于螺旋能比较大,螺旋结构多,会导致形状因子变大,和 $\varepsilon_h = -1.5$ 比,形状更加细长.因此从图4中也可以看到传输成功率比 $\varepsilon_h = -1.5$ 大些.形状因子的结果是和传输时间和传输成功率的计算结果完全对应的.

最后我们计算了分子链质心的均方位移 g .

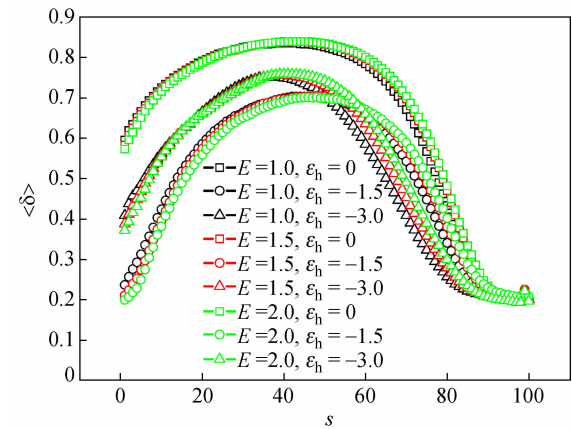


Fig. 6 Shape factor $\langle \delta \rangle$ in the process of translocation

均方位移 g 的变化可以看出分子链在传输过程中的扩散情况. 图 7 中可以看到电场对均方位移影响不明显. 而具有不同螺旋能结构的分子链在相同的电场下传输, 其均方位移的变化有着很大的不同. 结果表明, 在链外单体数 $s < 40$ 时, 均方位移变化幅度接近, 当 $s > 40$ 时, $\varepsilon_h = 0$ 的链, 传输过程中均方位移 g 增大的越快, 说明分子链越容易扩散, 导致传输时间短, 传输成功率高. 我们发现 $\varepsilon_h = -1.5$ 的链其均方位移比 $\varepsilon_h = -3.0$ 的链要小. $\varepsilon_h = -3.0$ 的链比 $\varepsilon_h = -1.5$ 的链容易扩散. 这也可以解释为什么 $\varepsilon_h = -3.0$ 链的传输成功率大于 $\varepsilon_h = -1.5$ 的链. 另外我们还计算了自回避链 (SAW chain) 的均方位移的变化. 在 $s < 10$ 的时候自回避链的均方位移和其他螺旋链变化幅度接近, 当 $s > 10$, 自回避链扩散的速度比螺旋链快的多. 相对快的扩散速率, 导致自回避链在穿越管道过程中造成出口处拥堵的几率很小, 因此传输成功率都在 80% 以上.

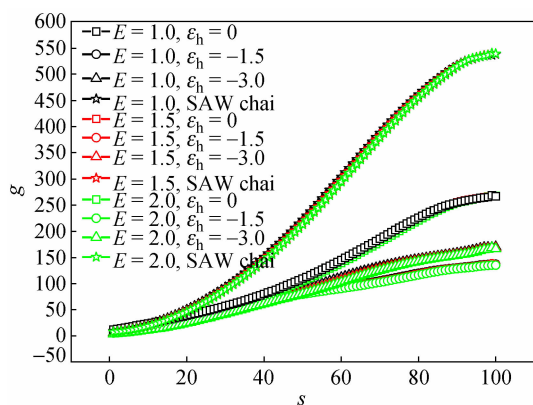


Fig. 7 Mean-square displacement of mass center g in the process of translocation

为了详细分析分子扩散的具体方向, 图 8 给出了质心均方位移 g 在垂直于 z 轴的分量 g_{xy} , 以及平行于 z 轴的分量 g_z 在传输过程中的变化. 图 8(a) 中可以看到 $\varepsilon_h = 0$ 和 -3.0 的链, 它们在垂直于 z 轴方向的扩散速度差不多, 而 $\varepsilon_h = -1.5$ 的链, 垂直于 z 轴的扩散要比其它两种链快. 图 8(b) 的趋势和图 7 的趋势一样. 发现 $\varepsilon_h = 0$ 的链主要是由于 z 轴方向的扩散快, 从而导致整体扩散快, 因此传输时间短, 传输成功率高. 而 $\varepsilon_h = -1.5$ 的链, z 轴方向的扩散并没有比垂直于 z 轴方向占优势许多, 整体来看, 其扩散的比较慢, 因此比其他两种链容易造成管道出口处堵塞, 这也是为什么其传输成功率比较低的一个原因. 而 ε_h

$= -3.0$ 的链, 为了形成更多螺旋结构, 管道外的链有必要在 z 方向适当伸展, 因此我们发现其质心位移在 z 方向上的变化比 $\varepsilon_h = -1.5$ 的要大, 但同时比 $\varepsilon_h = 0$ 的小. 和图 7 一样, 自回避链的质心位移在 z 轴上的变化是最大的.

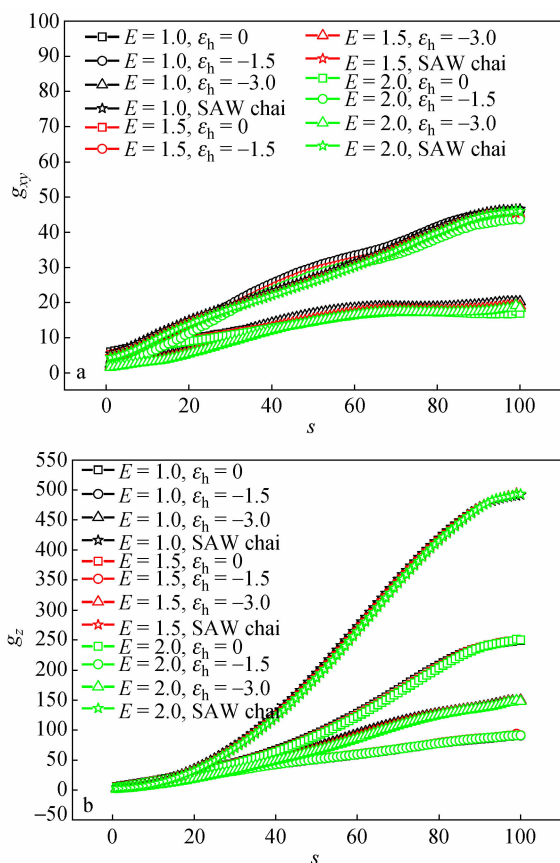


Fig. 8 Perpendicular and parallel to the z axis component g_{xy} (a) and g_z (b) in the process of translocation.

3 结论

不同螺旋结构的类蛋白质分子穿越管道有不同的动力学行为. 螺旋能参数很小的分子链很容易在电场作用下进入管道, 构象容易调整, 因此传输时间短, 传输成功率高. 在螺旋能较强的时候, 传输时间随着螺旋能的增强而增大. 而传输成功率则是从 $\varepsilon_h = 0$ 时的最大突然在 $\varepsilon_h = -1.5$ 时变小, 然后继续增大. 管道内单体数目 $\langle n_{in} \rangle$ 在传输过程中的变化存在最大值, 同时可以看出螺旋能越强, 最大值出现的越早. 形状因子 $\langle \delta \rangle$ 峰值的出现在管道外单体为 40 左右. $\varepsilon_h = 0$ 链的均方位移变化最快, 而 $\varepsilon_h = -1.5$ 的比 $\varepsilon_h = -3.0$ 的均方位移变化慢. 这些结果对于进一步了解类蛋白质分子的传输过程具有一定的指导意义.

REFERENCES

1 Lodish H, Baltimore D, Berk A, Zipursky S L, Matsudaira P, Darnell J. Molecular Cell Biology, 4th ed. : WH Freeman and Company, 2000. 220 ~ 248

2 Schatz G, Dobberstein B. Science, 1996, 271 : 1519 ~ 1526

3 Miller R V. Sci Am, 1998, 278 : 66 ~ 71

4 Salman H, Zbaida D, Rabin Y, Chatenay D, Elbaum M. Proc Natl Acad Sci USA, 2001, 98 : 7247 ~ 7252

5 Zanta M A, Belguise-Valladier P, Behr J P. Proc Natl Acad Sci USA, 1999, 96 : 91 ~ 96

6 High S. BioEssays, 1992, 14 : 535 ~ 540

7 Schatz G. Protein Sci, 1993, 2 : 141 ~ 146

8 Sung W, Park P J. Phys Rev Lett, 1996, 77 : 783 ~ 786

9 Muthukumar M. J Chem Phys, 1999, 111 : 10371 ~ 10374

10 Luo K, Huopaniemi, Nissila T A, Ying S C. J Chem Phys, 2006, 124 : 114704

11 Luo K, Ollila S T T, Huopaniemi I, Nissila T A, Pomorski P, Karttunen M, Ying S C, Bhattacharya A. Phys Rev E, 2008, 78 : 050901

12 Luo K, Ala-Nissila T, Ying S C, Bhattacharya A. Phys Rev E, 2008, 78 : 061918

13 Dubbeldam J L A, Milchev A, Rostsiashvili V G, Viglis T A. Europhys Lett, 2007, 79 : 18002

14 Lzmitli A, Schwartz D C, Graham M D. J. Chem Phys, 2008, 128 : 085102

15 Gauthier M G, Slater G W. Eur Phys J E, 2008, 25 : 17 ~ 23

16 Kong C Y, Muthukumar M. Electrophoresis, 2002, 23 : 2697 ~ 7782

17 Tian P, Smith G D. J Chem Phys, 2003, 119 : 11475 ~ 11483

18 Chan H S, Dill K A. Macromolecules, 1989, 22 : 4559 ~ 4573

19 Zhdanov V P, Kasemo B. Proteins: Structure, Function, Genetics, 1997, 29 : 508 ~ 516

20 Sun T T, Zhang L X. Polymer, 2004, 45 : 7759 ~ 7766

21 Sun T T, Zhang L X. Polymer, 2005, 46 : 5714 ~ 5722

22 Sun Tingting (孙婷婷), Zhang Linxi (章林溪). Acta Polymerica Sinica (高分子学报), 2006, (2) : 361 ~ 363

23 Sun Tingting (孙婷婷), Zhang Linxi (章林溪). Acta Polymerica Sinica (高分子学报), 2009, (9) : 949 ~ 952

24 Sun T T, Ma H Z, Jiang Z T. Chinese Physics B, 2012, 21 : 038702

25 Chern S S, Cárdenas A E, Coalson R D. J Chem Phys, 2001, 115 : 7772 ~ 7782

26 Sun T T, Zhang L X, Chen J, Shen Y. J Chem Phys, 2004, 120 : 5469 ~ 5475

27 Metropolis N, Rosenbluth A, Rosenbluth M, Teller A, Teller E. J Chem Phys, 1953, 21 : 1087 ~ 92

DYNAMICS OF DIFFERENT HELICAL PROTEIN-LIKE CHAINS
TRANSLOCATING THROUGH A CYLINDRICAL CHANNEL

Ting-ting Sun¹, Zhou-ting Jiang²

(¹ School of Information and Electronic Engineering, Zhejiang Gongshang University, Hangzhou 310018)

(² Department of Physics, China Jiliang University, Hangzhou 310018)

Abstract The dynamics of different helical protein-like chains translocating through a channel has been studied by Dynamical Monte Carlo (DMC) simulation. Translocation time, translocation probability, the number of monomers inside channel $\langle n_{in} \rangle$, shape factor $\langle \delta \rangle$ and mean-square displacement of center of mass g are discussed. It is shown translocation time of protein-like chain with small helical energy is short, and changes little. However, for chains of large helical energy, the translocation time quickly increases when ε_h becomes stronger. The results show that the translocation probability is smaller as the electric field becomes stronger. For different helical chains the translocation probability of $\varepsilon_h = 0$ is the largest, about 80%, smaller than that of SAW chain. But it suddenly drops for $\varepsilon_h = -0.5$. Then the translocation probability increases again as the helical energy becomes stronger. Furthermore, the curve of $\langle n_{in} \rangle$ shows the translocation process of SAW chains is more steady than that of protein-like chains. The maximum value in the curves of $\langle \delta \rangle$ suggests there exists the loosest conformation during translocation. Another discussion about the mean-square displacement of center of mass g shows that g of $\varepsilon_h = 0$ changes faster than others. It shows diffusion of $\varepsilon_h = 0$ is the fastest. It is also observed that the value g of $\varepsilon_h = -3.0$ changes faster than that of $\varepsilon_h = -1.5$. The discussion of shape factor and mean-square displacement can explain the different properties of different helical protein-like chains. All these studies will be useful for the complex translocation behaviors of macromolecules.

Keywords Dynamical Monte Carlo (DMC), Protein-like chain, Helical structure