

论文编号 S8-0236

纳米孔技术研究蛋白质构象动力学

张明焜¹, 吕守芹^{2*}, 龙勉²

(1. 中国科学院 重庆绿色智能技术研究院, 重庆 400714; 2. 中国科学院 力学研究所, 北京 100190)

* E-mail: lsq@imech. ac. cn

目的 蛋白质在履行生命功能时会形成多种构象态。检测和分析蛋白质的构象和变构对于阐明蛋白质结构和功能的关系至关重要。纳米孔技术具有水环境检测、高时空分辨率、无标记和高通量等优势,在蛋白质检测中具有巨大潜力。本研究将利用纳米孔传感技术探索 $\alpha X\beta 2$ 整合素的不同构象态和变构过程。**方法** 利用分子动力学(MD)模拟建立了纳米孔传感系统,以检测 $\alpha X\beta 2$ 的不同构象态。此外,基于拉伸分子动力学(SMD)模拟建立了纳米孔传感和原子力探针拉伸联用的方法,调控并探测了蛋白质的变构过程,并基于自由能分析了纳米孔空间约束对变构模式的影响。**结果** 成功解耦了 $\alpha X\beta 2$ 的构象和取向对纳米孔离子电流的调制,估计了 3 种构象态的近似椭球形貌。利用椭球体积和形状特征区分了不同的构象态。此外,分析了纳米孔内的电导率的分布,厘清了孔壁和蛋白质对电导率的影响规律。进一步,建立了一种基于电、力耦合传感的新方法,以探测纳米孔中蛋白质的构象动力学,并通过新型 SMD-椭球近似方法实时解析了中间态构象的结构特征。结果表明,纳米孔约束增加了 $\alpha X\beta 2$ 构象伸展所需克服的能垒。**结论** 本研究通过对离子电流和蛋白质变构的综合分析,提升了纳米孔技术用于蛋白质构象和变构的检测能力。(国家重点研发计划项目,2016YFA0501601,2023YFF0722304;中国科学院青年创新促进会,2022390)

论文编号 S8-0272

持续性高过载下人脑的多孔弹性响应

田金^{1,2,3}, 刘少宝^{4,5}, 徐峰^{2,3*}, 卢天健^{4,5*}

(1. 西安交通大学第二附属医院, 西安 710061; 2. 西安交通大学 生命科学与技术学院, 生物医学信息工程教育部重点实验室, 西安 710049; 3. 西安交通大学 仿生工程与生物力学研究所, 西安 710049; 4. 南京航空航天大学 航空航天结构力学及控制全国重点实验室, 南京 210016; 5. 南京航空航天大学 多功能轻量化材料与结构工信部重点实验室, 南京 210016)

* E-mail: fengxu@xjtu. edu. cn; tjlu@nuaa. edu. cn

目的 在航空航天活动中,乘组人员常承受多种极端过载,持续性高过载是一大挑战。它们会影响人体多种生理功能,其中对脑功能的影响需要特别关注。然而,目前对大脑在持续性高过载下的响应研究还非常有限,现有的力学模型没有考虑脑的多孔含液特性,也不足以揭示过载的生物力学效应存在方向性差异的机制。因此,本工作围绕降低航空航天活动中脑损伤风险的需求,针对大脑在持续性高过载下的力学响应展开研究。**方法** 通过考虑大脑的多孔含液特性以及头部的复杂结构,建立了头部结构的三维仿真模型。通过分析+Gz、+Gx和-Gy三个方向上大小为1、2、4和8G过载条件,得到了脑组织的颅内液体压力分布、位移分布和von Mises应力分布。**结果** 脑对不同方向过载的响应存在显著差异,+Gz产生的较大响应出现在顶叶、枕叶、基底核、小脑和脑干区域,+Gx产生的最大响应出现在额叶,而-Gy产生的最大响应出现在颞叶,而脑的复杂形状和结构是这种差异性的基础。**结论** 较大力学响应区与过载导致的脑功能障碍类型之间存在一致性。本研究有助于加深人们对持续性高过载对脑功能影响机制的理解,为降低飞行人员脑损伤的风险提供借鉴。