
含氟醇生物溶剂调控多肽 α - 螺旋结构的分子动力学研究 MDPI Liquids

作者：writer 来源：科学网

本文原地址：<https://www.iikx.com/news/progress/39614.html>

本文仅供学习交流之用，版权归原作者所有，请勿用于商业用途！

含氟醇生物溶剂调控多肽 α - 螺旋结构的分子动力学研究 MDPI Liquids。论文标题：Fluorinated Alcohol Biosolvents and α -Helix Peptide Secondary Structure: A Molecular Dynamics Study on the Solvent Concentration Effect

期刊名：<https://www.mdpi.com/2673-8015/6/1/6>

期刊名：Liquids

期刊主页：<https://www.mdpi.com/journal/liquids>

Casoria, M.; Pagliai, M.; Andreini, C.; Papini, A.M.; Procacci, P.; Macchiagodena, M. Fluorinated Alcohol Biosolvents and α -Helix Peptide Secondary Structure: A Molecular Dynamics Study on the Solvent Concentration Effect. Liquids 2026, 6, 6. <https://doi.org/10.3390/liquids6010006>

含氟醇类生物溶剂（TFE与HFIP）是多肽二级结构的高效稳定剂，但其分子作用机制尚未完全明确。本文基于升级GAFF2力场开展全浓度分子动力学模拟，系统揭示三氟乙醇（TFE）与六氟异丙醇（HFIP）对蜂毒肽（Melittin, MLT） α - 螺旋结构的调控规律，为多肽结构稳定与药物设计提供原子水平机理解释。

研究首先对0~100%体积分数的TFE/水与HFE/水混合体系进行模拟，计算密度、介电常数、混合焓等热力学性质。结果显示，体系密度随含氟醇浓度升高而增大，介电常数则持续降低，计算值与实验数据高度吻合。混合焓分析表明，TFE与水全程为吸热混合，而HFIP在低浓度下微吸热、高浓度下放热，这一差异源于HFIP更强的氢键能力与双三氟甲基结构带来的疏水效应。径向分布函数证实，两种溶剂均会随浓度升高形成分子簇，且HFIP成簇趋势更显著。

在此基础上，团队对蜂毒肽在10%~50%含氟醇浓度下的构象演化进行100 ns模拟。纯水中蜂毒肽整体无序，仅局部存在微弱螺旋倾向；加入含氟醇后，多肽迅速形成稳定双 α -螺旋结构，中间由柔性区域连接。结构分析显示，30%体积分数为最佳螺旋稳定浓度：TFE在30%时达到最优稳定效果，HFIP则在20%~30%区间效果最佳，浓度过高会导致末端区域解旋。

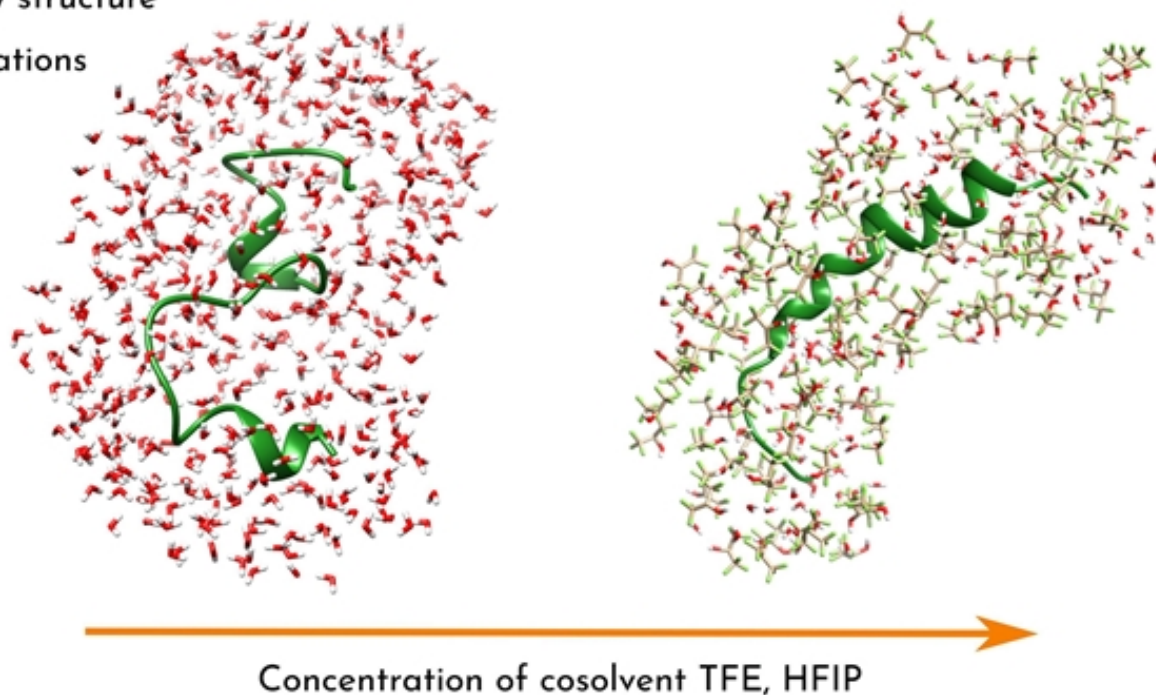
局部溶剂浓度（LCC）分析揭示关键作用机制：含氟醇分子会在多肽主链与疏水侧链周围形成富集层，排斥水分子并降低局部介电常数，从而强化分子内氢键、稳定 α -螺旋。两种溶剂表现出

差异：HFIP在肽链中部富集程度更高，而TFE更易受浓度影响；肽链两端与柔性连接区溶剂富集度较低，仍保留部分水合环境。

该研究验证了升级后GAFF2力场在含氟醇体系中的准确性，清晰阐明溶剂成簇→局部富集→排开水分子→氢键增强→螺旋稳定的完整机制。研究明确了最佳稳定浓度区间，并区分TFE与HFIP的作用差异，为多肽药物、疫苗抗原与蛋白质制剂的结构稳定设计提供了精准的分子依据与模拟方法学参考。

Secondary structure

MD simulations



图例：助溶剂2,2,2-三氟乙醇 (TFE)，1,1,1,3,3,3-六氟-2-丙醇 (HFIP)的浓度。

期刊简介

主编：Prof. Dr. Enrico Bodo, University of Rome La Sapienza, Italy

Liquids (ISSN 2673-8015) 创刊于2021年，是一本国际性、同行评审的开放获取期刊。期刊研究领域涵盖物理学中的液态理论、合成与分析化学、生物学的多个领域，以及工程学和气象学中的流体动力学等。目前，Liquids 已被ESCI (Web of Science)、Scopus (CiteScore 2.9)、CAPlus/SciFinder 等多个主要数据库收录。

2024 CiteScore 2.9 Time to First Decision 35.3Days Acceptance to Publication 4.3Days

来源：Liquids

更多 科学进展 请访问 <https://www.iikx.com/news/progress/>

本文版权归作者所有，请勿用于商业用途，[爱科学iikx.com](http://iikx.com)转发