

荧光光谱法测定大蒜中三种含硫氨基酸与 BSA 间的相互作用

李星星, 张翔, 黄雪松*

暨南大学理工学院食品科学与工程系, 广东 广州 510632

摘要 大蒜中的含硫氨基酸, 如脱氧蒜氨酸(SAC)、蒜氨酸(SACS)、S-烯丙基硫基半胱氨酸(SAMC), 具有抗肿瘤、抗氧化等多种生理、药理活性, 这些活性应当与上述含硫氨基酸和存在于生物体内的蛋白质等生物大分子之间的相互作用有直接关系。为探明其关系, 本文以牛血清蛋白(BSA)为模型蛋白, 运用荧光光谱法和紫外吸收光谱法, 研究了 pH 7.40 的 Tris-HCl 缓冲溶液中, 大蒜中 SAC, SACS, SAMC 与 BSA 的相互作用。采用荧光分光光度计, 以 280 nm 为激发波长, 扫描 300~400 nm 的荧光发射光谱; 采用紫外分光光度计, 扫描 SAMC 的 300~400 nm 紫外吸收光谱。荧光光谱和紫外吸收光谱结果分析表明: BSA 与 SAC, SACS 的猝灭类型是动态猝灭。BSA 与 SAMC 的猝灭类型是静态猝灭, 在 298 和 310 K 下两者的结合常数分别为 6.18×10^3 和 $5.54 \times 10^3 \text{ L} \cdot \text{mol}^{-1}$, 结合作用较强; 对应温度下 BSA 与 SAMC 均近似为 1 个结合位点, 可形成 1:1 的复合物, 推断其在生物体内能被较好的储存与转运; 两者的结合距离为 1.61 nm。两者结合的热力学参数在 298 和 310 K 下的 ΔG 分别为 -21.63 和 $-22.21 \text{ kJ} \cdot \text{mol}^{-1}$, 说明反应是一个自发进行的过程; 其 ΔH 为 $-7.06 \text{ kJ} \cdot \text{mol}^{-1}$; 在 298 和 310 K 温度下的 ΔS 分别为 48.89 和 $46.99 \text{ J} \cdot \text{mol}^{-1} \cdot \text{K}^{-1}$, 结合 ΔH 和 ΔS 的大小可判断两者的结合以静电引力作用为主。研究表明 SAMC 与 BSA 的结合作用较强, 为其可作为药物分子提供了理论依据, 同时这些结果也为进一步研究三种含硫氨基酸与 BSA 等大分子的相互作用、开发与利用提供了理论依据。

关键词 脱氧蒜氨酸; 蒜氨酸; S-烯丙基硫基半胱氨酸; 牛血清白蛋白

中图分类号: TS255 **文献标识码:** A **DOI:** 10.3964/j.issn.1000-0593(2020)11-3483-06

引言

大蒜 (*Allium sativum* L., 又称为葫蒜、葫、独蒜等), 富含含硫氨基酸, 如蒜氨酸 (S-allyl cysteine sulfoxid, SACS)、脱氧蒜氨酸 (S-allyl cysteine, SAC)、S-烯丙基硫基半胱氨酸 (S-allyl mercapto cysteine, SAMC; 见图 1) 等, 它们具有清除自由基、抗糖尿病等多种功效。大蒜的保健、药

用等生物学功能, 应当同这些含硫氨基酸和存在于生物体内的蛋白质等生物大分子之间的相互作用有直接关系。药物分子进入体内后与血清白蛋白结合, 在体内被运输、储存, 发挥药用价值, 常常以 BSA 作为模型蛋白阐明研究保健功能成分与血清蛋白之间的结合方式、结合位点等相互作用机制; 这些机制的阐明, 对于保健食品、药物等产品的开发与应用, 具有重要的理论指导价值。

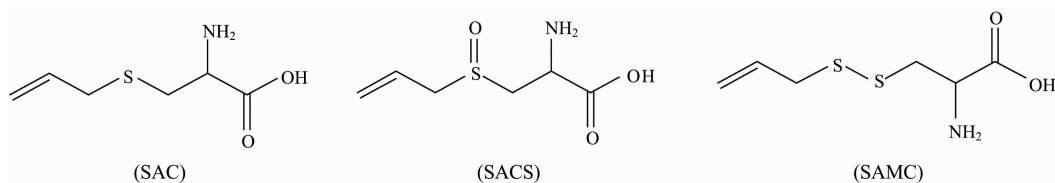


图 1 三种含硫氨基酸的结构式

Fig. 1 Chemical structure of three kinds of sulfur-containing amino acids

收稿日期: 2019-07-06, 修订日期: 2019-11-13

基金项目: 广东省重点研发计划项目(2018B020239001)和国家自然科学基金项目(31471595)资助

作者简介: 李星星, 1994 年生, 暨南大学理工学院食品科学系硕士研究生 e-mail: 931244501@qq.com

* 通讯联系人 e-mail: thxs@jnu.edu.cn

马雪红^[1]报道了 SACS 与 BSA、HSA 的结合作用,即在 298 K 下结合常数分别为 9.81×10^2 和 $2.27 \times 10^2 \text{ L} \cdot \text{mol}^{-1}$; SAC 与 BSA 之间的作用主要为静电引力,与 HSA 之间的作用主要为疏水作用力。Sun^[2]等报道了 SACS 和 HAS 的结合作用,在 298 K 结合常数为 $1.58 \times 10^4 \text{ L} \cdot \text{mol}^{-1}$; SAC 与 BSA 之间的作用主要为氢键和范德华力。由此可见,这两种氨基酸因结构不同结合作用相差较大,而 SAMC 与血清白蛋白的结合作用还未见报道,同时三种含硫氨基酸因结构不同引起结合作用变化等也需要进一步阐明。为弥补这些不足,本论文拟采用荧光光谱法和紫外吸收光谱法分析三种含硫氨基酸与牛血清白蛋白的相互作用,计算其结合常数、结合作用力类型、热力学参数、结合距离、结合位点等,以为三种含硫氨基酸的开发与利用提供相应的理论依据。

1 实验部分

1.1 仪器与试剂

电子分析天平 (AX205DR, METTLER TOLEDO); 荧光分光光度计 (PE LS 45, 美国 Perkin Elmer 公司); 紫外分光光度计 (UV-9600, 北京瑞利分析仪器公司)。SAC, SACS 和 SAMC 均来自于实验室化学合成 (经 MS, HRMS 和 ¹H-NMR 确定合成的均为目标产物,纯度均大于 95%); 牛血清白蛋白 (BSA, 上海伯奥生物科技有限公司, LOT: 080325); 实验用水为超纯水。

1.2 方法

1.2.1 荧光光谱的测定

在 10 mL 容量瓶中依次加入 2 mL pH 7.40 的 Tris-HCl 缓冲溶液、2 mL 的 $0.50 \text{ mol} \cdot \text{L}^{-1}$ NaCl 溶液, 6 mL 浓度为 $3 \times 10^{-5} \text{ mol} \cdot \text{L}^{-1}$ 的 BSA 溶液。取 3 mL 该溶液与石英比色皿中,依次加入 20 μL SAC, SACS ($0.05 \text{ mol} \cdot \text{L}^{-1}$), 10 μL SAMC ($0.05 \text{ mol} \cdot \text{L}^{-1}$) 对照溶液,共加 6 次,混匀,得到 SAC、SACS 浓度分别为: (0.00, 3.31, 6.57, 9.80, 13.0, 16.1, 19.2) $\times 10^{-4} \text{ mol} \cdot \text{L}^{-1}$ 的 BSA 混合溶液, SAMC 浓度即为前面两种氨基酸的一半。最后将反应液分别在 298 和 310 K 温度下保持 5 min。在荧光分光光度计操作界面中,选择荧光扫描模式。以 280 nm 为激发波长,扫描 300~400 nm 荧光光谱并记录荧光强度的变化。

1.2.2 实验数据分析

使用 Origin8.5 (Origin Lab Co., Northampton, MA, USA) 软件进行绘图, Chemdraw 绘制化合物的结构式; 使用 Microsoft Excel 对数据进行统计分析。

2 结果与讨论

2.1 三种含硫氨基酸与 BSA 相互作用的荧光光谱

图 2 中,在 350 nm 处出现了较强的荧光峰,这是 BSA 分子固有的内源荧光物质色氨酸、酪氨酸及苯丙氨酸等酚型氨基酸残基的综合效应所发射的荧光^[3]; 该峰处的荧光强度变化,反映了溶剂、溶质与 BSA 之间的相互作用。由图 2 各

图中可以看出:

(1) 三种含硫氨基酸均具有荧光猝灭作用,且荧光猝灭强度大小分别为: SAMC > SAC > SACS。如在 298 K 时, SAMC 随着浓度的增加 (a—g) 荧光强度下降了 362 a. u., 而 SAC 荧光强度仅下降了 88 a. u., 但高于 SACS 下降量 43 a. u.

(2) 三种含硫氨基酸的浓度越高,对 BSA 的荧光基团猝灭作用越强。如在 298 K 时, SACS 样品中随着浓度的增加 (a—g), 荧光强度从 627 a. u. 下降为 584 a. u.; SAC 荧光强度从 670 a. u 下降为 582 a. u.; SAMC 荧光强度从 639 a. u 下降为 277 a. u.

(3) 温度影响三种含硫氨基酸与 BSA 的荧光猝灭作用。如在 298 K 下, SAC 和 SAMC 的荧光强度下降量分别为 88 和 362 a. u., 在 310 K 的下降量分别为 78 和 257 a. u., 温度越高下降量越少; 而在同样条件下 SACS 的荧光强度下降量分别为 43 和 44 a. u., 猝灭效果不佳、温度差异引起的荧光强度的变化较小。

综上所述,可初步判断 SACS, SAC 和 SAMC 均具有荧光猝灭作用, SAMC 的荧光猝灭作用最强。

2.2 据 Stern-Volmer 方程确定三种含硫氨基酸对 BSA 的荧光猝灭作用类型

根据 Stern-Volmer 方程式 (1) 可得荧光猝灭常数。以 F_0/F 对 $[Q]$ 作图, 得到不同温度条件下三种含硫氨基酸对 BSA 的 Stern-Volmer 函数 (图 3), 由截距求得 K_q 和 K_{sv} (见表 1)。

$$F_0/F = 1 + K_{sv}[Q] = 1 + K_q\tau_0[Q] \quad (1)$$

式 (1) 中: F 和 F_0 分别表示有无猝灭剂时 BSA 的荧光强度; $[Q]$ 为猝灭剂浓度 ($\text{mol} \cdot \text{L}^{-1}$); K_{sv} 为荧光猝灭常数 ($\text{L} \cdot \text{mol}^{-1}$); K_q 为双分子猝灭速率常数 [$\text{L} \cdot (\text{mol} \cdot \text{s})^{-1}$]; τ_0 为无猝灭剂时荧光分子的平均寿命 (一般约 10^{-8} s)。

一般地, 各类荧光动态猝灭剂的 K_q 最大为 $(1.0 \sim 2.0) \times 10^{10} \text{ L} \cdot (\text{mol} \cdot \text{s})^{-1}$ ^[4-5], 且常随温度升高稍微增加; 而静态猝灭剂的 K_q 则远大于 $2.0 \times 10^{10} \text{ L} \cdot (\text{mol} \cdot \text{s})^{-1}$, 并常随着温度的升高有一定程度的降低。由表 1 中看出: 在所测条件下只有 SAMC 的 $K_q > 2.0 \times 10^{10} \text{ L} \cdot (\text{mol} \cdot \text{s})^{-1}$, 且随着温度的升高明显降低; 其他两种氨基酸的 K_q 值均远小于 $2.0 \times 10^{10} \text{ L} \cdot (\text{mol} \cdot \text{s})^{-1}$ 。而且只有 SAMC 的 K_{sv} 随温度的升高明显下降, 可以再次表明 SAMC 对 BSA 的猝灭作用为静态猝灭。而 SACS 的 K_{sv} 随温度的升高都有所增加, SAC 无明显差异, 则表明为动态猝灭。

因此, 综合 K_q 和 K_{sv} 两方面的结果, 可以判断 SAMC 对 BSA 的猝灭作用为静态猝灭, SACS, SAC 对 BSA 的猝灭作用为动态猝灭。

2.3 SAMC 与 BSA 相互作用的结合常数和结合位点

静态猝灭剂浓度 $[Q]$ 、结合常数 K_A 、荧光强度 F 和结合位点之间 n 的关系可用式 (2) Lineweaver-Burk 双对数方程来表述。

$$\lg(F_0 - F)/F = \lg K_A + n \lg [Q] \quad (2)$$

式中: F_0 , F 和 $[Q]$ 含义同式 (1); K_A 为化合物与血清白蛋白在不同温度下的结合常数 ($\text{L} \cdot \text{mol}^{-1}$), 通过式 (2) 方程的

截距求真数即为 K_A 值; n 为结合位点数。按式(2)分别绘制 SAMC 与 BSA 在 298 和 310 K 温度下的 \sim 的双对数图(图 4)

后, 由其截距和斜率可以求出 SAMC 与 BSA 的结合常数及结合位点数(见表 2)。

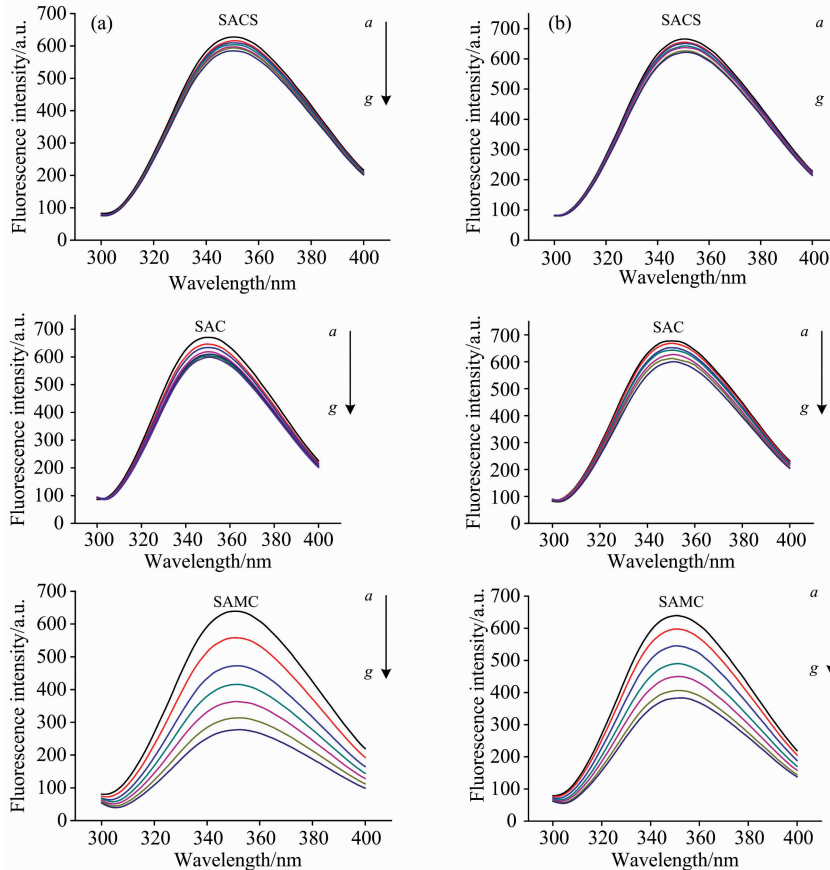


图 2 不同浓度 SACS, SAC, SAMC 与 BSA 相互作用的荧光发射光谱

SACS 和 SAC 的样品浓度(a—g)依次为(0.00, 3.31, 6.57, 9.80, 13.00, 16.10, 19.20) $\times 10^{-4}$ mol \cdot L $^{-1}$;
SAMC 的样品浓度(a—g)为前面的一半(A 组为 298 K、B 组为 310 K)

Fig. 2 Fluorescence emission spectra of different concentrations of SACS, SAC, SAMC and BSA

SACS and SAC (a—g) were (0.00, 3.31, 6.57, 9.80, 13.00, 16.10, 19.20) $\times 10^{-4}$ mol \cdot L $^{-1}$;
SAMC(a—g) was half of the previous one (298 K on the A and 310 K on the B group)

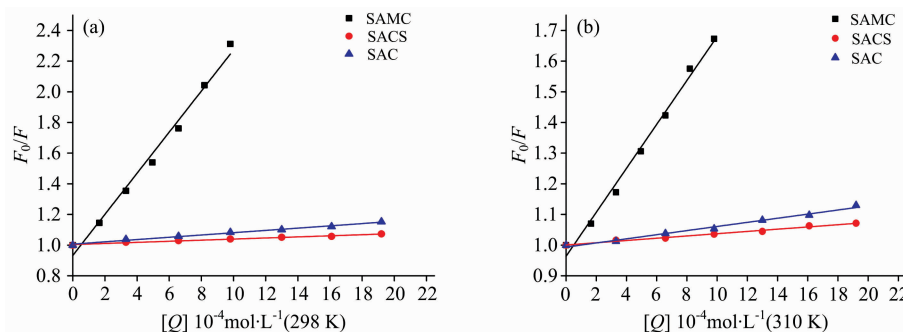


图 3 不同温度下三种含硫氨基酸的 Stern-Volmer 函数

(a): 298 K; (b): 310 K

Fig. 3 Stern-volmer function of three kinds of sulfur-containing amino acids at different temperature

(a): 298 K; (b): 310 K

由表 2 看出: SAMC 和 BSA 的结合位点数 n 分别为 1.224 0 和 1.294 2, 即近似形成一个结合位点, 为 1 : 1 复合

物; 其结合常数 K_A 数量级 $> 10^3$, 表明它们之间的结合力较强, SAMC 在生物体内可以较好的储存与转运。由图 1 可以

看出：三种含硫氨基酸都含有相同的烯丙基和丙氨酸的结构，其差异仅是 SAMC 有二硫键结构，而 SAC 和 SACS 都

没有二硫键，说明 SAMC 上二硫键的存在使得 SAMC 与 BSA 的结合为静态猝灭，即相互作用较强。

表 1 三种含硫氨基酸与 BSA 的线性方程、相关系数及荧光猝灭常数
Table 1 Linear equations, correlation coefficients and fluorescence quenching constants of three sulfur-containing amino acids and BSA

化合物种类	$K_{SV}/(L \cdot mol^{-1})$	$K_q/[L \cdot (mol \cdot s)^{-1}]$	Stern-Volmer equation	R^2	T/K
SACS	3.5	3.5×10^8	$y=0.0035x+1.0067$	0.9994	298
	3.7	3.7×10^8	$y=0.0037x+1.0009$	0.9842	310
SAC	7.1	7.1×10^8	$y=0.0071x+0.9882$	0.9908	298
	7.0	7.0×10^8	$y=0.0070x+1.0127$	0.9921	310
SAMC	1.34×10^3	1.34×10^{11}	$y=0.1340x+0.9327$	0.9884	298
	7.16×10^2	7.16×10^{10}	$y=0.0716x+0.9639$	0.9917	310

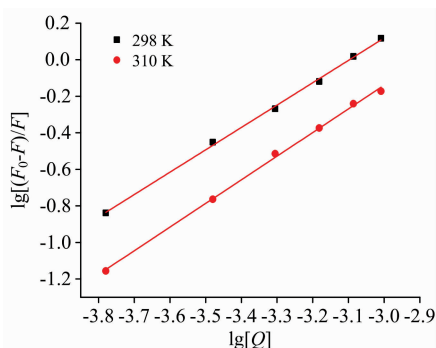


图 4 不同温度下三种含硫氨基酸的 Stern-Volmer 函数

Fig. 4 Stern-Volmer function of three kinds of sulfur-containing amino acid at different temperature

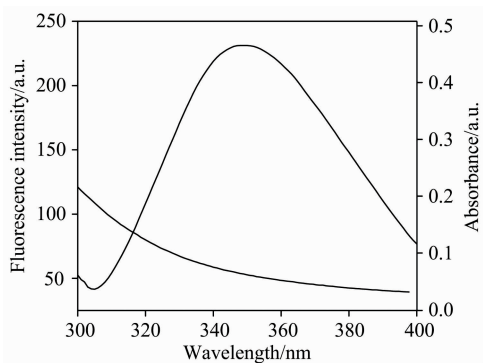


图 5 SAMC 的紫外-可见吸收光谱与荧光的光谱重叠和 BSA 的发射光谱

$c_{SAMC} = 1.0 \times 10^{-6} mol \cdot L^{-1}$; $c_{BSA} = 1.0 \times 10^{-6} mol \cdot L^{-1}$;
 $T = 298 K$

Fig. 5 Spectrum overlap of UV-Visible absorption spectrum and fluorescence of SAMC and emission spectrum of BSA

$c_{SAMC} = 1.0 \times 10^{-6} mol \cdot L^{-1}$; $c_{BSA} = 1.0 \times 10^{-6} mol \cdot L^{-1}$;
 $T = 298 K$

表 2 SAMC 与 BSA 结合常数及结合位点数
Table 2 SAMC and BSA binding constants and number of binding sites

化合物	n	lgK_A	$K_A/(L \cdot mol^{-1})$	R^2	T/K
SAMC	1.2240	3.7911	6.18×10^3	0.9986	298
	1.2942	3.7432	5.54×10^3	0.9985	310

2.4 SAMC 与 BSA 相互作用的热力学参数和作用力

小分子与蛋白质大分子(如 BSA)的作用力包括氢键、范德华力、静电引力、疏水作用力等^[6]。Ross 理论^[7]认为：当 $\Delta H \geq 0$, $\Delta S > 0$ 时，分子间的作用力为典型的疏水作用力；当 $\Delta H < 0$, $\Delta S > 0$ 时主要为静电引力；当 $\Delta H > 0$, $\Delta S < 0$ 主要为氢键和范德华力。当温度变化不大时， ΔH 可看作一个常数。据此，可以判断化合物与蛋白分子结合作用力的类型。

按式(2)可计算出不同温度下 SAMC 与 BSA 作用的结合常数 K_A ，298 和 310 K 下的分别记为 K_{A1} 和 K_{A2} 。按式(3)和式(4)以 $\ln K_A$ 对 $1/T$ 作图，求得 SAMC 与 BSA 的热力学参数(见表 3)，然后根据热力学参数判断作用力类型^[8]。

$$\Delta G = -RT \ln K_A = \Delta H - T\Delta S \tag{3}$$

$$\ln \left(\frac{K_{A2}}{K_{A1}} \right) = \left(\frac{1}{T_1} - \frac{1}{T_2} \right) \frac{\Delta H}{R} \tag{4}$$

式中， ΔH , ΔG 和 ΔS 分别表示焓，自由能和熵的变化， K_{A1} 和 K_{A2} 分别为 298 和 310 K 下的 K_A ，其中 T_1 和 T_2 分别为 298 和 310 K。

表 3 不同温度下 SAMC 的热力学参数
Table 3 Thermodynamic parameters of SAMC at different temperatures

化合物	$\Delta H/ (kJ \cdot mol^{-1})$	$\Delta G/ (kJ \cdot mol^{-1})$	$\Delta S/ (J \cdot mol^{-1} \cdot K^{-1})$	T/ K
SAMC	-7.06	-21.63	48.89	298
		-22.21	46.99	310

据表 3 结果: $\Delta G < 0$, 即 SAMC 与 BSA 的作用(或反应)是自由能减少、自发进行的过程; 它们作用的 $\Delta H < 0$, $\Delta S > 0$, 据 Ross 理论^[7]可以判断 SAMC 与 BSA 的结合作用力主要表现为静电引力。

2.5 SAMC 与 BSA 相互作用的结合距离^[8]

对于小分子与蛋白质结合形成络合物, 根据偶极-偶极非辐射能量转移效率(E)即 Förster 理论^[9][见式(5)], 可以求出结合位置相对于蛋白质分子中发光基团之间的距离(r), r 越小, 药物分子越有利于被蛋白质存储与转运, 越能发挥其药理作用。

$$E = \frac{R_0^6}{R_0^6 + r^6} \quad (5)$$

式(5)中, R_0 是能量转移效率 E 为 50% 时的临界距离, R_0 由式(6)求出

$$R_0^6 = 8.79 \times 10^{-25} K^2 N^{-4} \phi J \quad (6)$$

式(6)中, K 为偶极空间取向因子, N 为介质的折射指数, ϕ 为给体的光量子效率, 给体(蛋白)荧光发射光谱与受体(药物)吸收光谱间的光谱重叠部分为 J 式(7)

$$J = \frac{\int_0^\infty F(\lambda)\epsilon(\lambda)\lambda^4 d\lambda}{\int_0^\infty F(\lambda)d\lambda} \quad (7)$$

式(7)中, $F(\lambda)$ 为荧光给体(BSA)在波长处的荧光强度, 则 $\epsilon(\lambda)$ 为受体(SAMC)在波长处的摩尔吸收系数, 能量转移效率 E 可由式(8)求出。

$$E = 1 - F/F_0 \quad (8)$$

将 $1.0 \times 10^{-6} \text{ mol} \cdot \text{L}^{-1}$ BSA 荧光发射光谱和等浓度 SAMC 紫外吸收光谱输入 Origin8.5 软件中作图(图 5), 按式(7)求得图中光谱重叠部分面积。根据文献^[10]报道, 色氨酸的量子产率为 0.118, 折射指数 N 取水和有机物的平均值 1.366, 空间取向因子 K^2 取给体和受体各向同性随机分布的平均值 2/3。将以上各量代入式(6)中, 计算临界结合距离 R_0 。按式(8)求得能量转移效率 E , 然后根据 E 和 R_0 按式(5)求得结合距离 r 。计算可得 $J = 8.62 \times 10^{-20} \text{ cm}^3 \cdot \text{L} \cdot \text{mol}^{-1}$, $R_0 = 1.17 \text{ nm}$, $E = 0.13$, $r = 1.61 \text{ nm}$ 。当 BSA 发射荧光时, BSA 的发射光谱与 SAMC 的紫外吸收光谱应有足够的重叠, 最大距离不应超过 7 nm ^[11]。而计算结果 $r = 1.61 \text{ nm}$, 且 $0.5R_0 < r < 1.5R_0$, 说明 SAMC 和 BSA 的结合距离满足要求、SAMC 和 BSA 之间存在能量转移。

3 结 论

通过荧光光谱法和紫外吸收光谱法研究了 BSA 与 SAC, SACS 和 SAMC 的相互作用, 其与 SAMC 之间是静态猝灭, 与 SAC 和 SACS 之间则是动态猝灭; SAMC 与 BSA 相互作用的结合位点数接近 1; 两者主要以静电引力结合的距离 $r = 1.61 \text{ nm}$ 。其结合的热力学参数 ΔH 为 $-7.06 \text{ kJ} \cdot \text{mol}^{-1}$; 298 和 310 K 下的 ΔG 分别为 -21.63 和 $-22.21 \text{ kJ} \cdot \text{mol}^{-1}$; 对应温度下的 ΔS 分别为 48.89 和 $46.99 \text{ J} \cdot \text{mol}^{-1} \cdot \text{K}^{-1}$ 。这些结果也为进一步研究三种含硫氨基酸与 BSA 等大分子的相互作用、开发与利用提供了理论依据。

References

- [1] MA Xue-hong, SONG Bai-ling, XIAO Wen-jun, et al(马雪红, 宋白灵, 肖文浚, 等). Spectroscopy and Spectral Analysis(光谱学与光谱分析), 2017, 37(6): 1826.
- [2] Sun Y E, Wang W D. Journal of Food and Drug Analysis, 2017, 25(2): 385.
- [3] WANG Shuang-shuang, NI Yong-nian(汪双双, 倪永年). Chinese J. Anal. Lab.(分析试验室), 2010, 29(1): 10.
- [4] Zhao X, Liu R, Teng Y, et al. Sci. Total Environ., 2011, 409: 892.
- [5] Sun Y, Shieh A, Kim S H, et al. Bioorg Med. Chem. Lett., 2016, 26: 2834.
- [6] Zhang L H, Liu B S, Li Z Y, et al. Luminescence, 2014, 30(5): 686.
- [7] Ross P D, Subramanian S. Biochemistry, 1981, 20(11): 3096.
- [8] Nadia Barbero, Ermanno Barni, Claudia Barolo, et al. Dyes and Pigments, 2009, 80(8): 307.
- [9] Forster T. Modern Quantum Chemistry. New York: Academic Press, 1965.
- [10] Stryer L. Annual Review of Biochemistry, 2003, 47(47): 819.
- [11] Bai Z, Liu Y, Zhang P, et al. Luminescence, 2016, 31(3): 688.

Interaction Between Three Sulfur-Containing Amino Acids in Garlic and Bovine Serum Albumin Determined by Fluorescence Spectrometry

LI Xing-xing, ZHANG Xiang, HUANG Xue-song*

Department of Food Science and Engineering, Institute of Technology, Jinan University, Guangzhou 510632, China

Abstract Sulfur-containing amino acids (SAA) such as S-allyl cysteine (SAC), S-allyl cysteine sulfoxide (SACS), and S-allyl mercapto cysteine (SAMC) from garlic (*Allium sativum* L.) have many bioactivities like anti-tumor, antioxidant and so on. These bioactivities should be directly related to the interaction between the above-mentioned SAA and biomacromolecules such as proteins in organisms. In order to elucidate the relationship, the model system was made of by bovine serum albumin (BSA) and SAA. The interaction between SAC, SACS or SAMC and BSA was investigated in Tris-HCl buffer solution at pH 7.40 by fluorescence spectroscopy (FS) and ultraviolet absorption spectroscopy (UVS). FS was determined by scanning from 300 to 400 nm at 280 nm excitation wavelength. And UVS was determined by scanning the SAMC solution from 300 to 400 nm. FS and UVS results show that the quenching type of BSA with SAC or SACS is dynamic quenching, and the one of BSA and SAMC is static quenching. The binding constants of BSA and SAMC solution at 298 K and 310 K are 6.18×10^3 and 5.54×10^3 L · mol⁻¹, respectively, with strong binding effect. The number of the binding site of BSA and SAMC at above temperature is approximating to 1, i. e. forming a 1 : 1 complex, which can be deduced that SAMC is well stored and transported in organisms. The binding distance between BSA and SAMC is 1.61 nm. The binding ΔG of BSA and SAMC is -21.63 and -22.21 kJ · mol⁻¹ at 298 and 310 K, respectively, indicating that the reaction is a spontaneous process. The binding ΔH is about -7.06 kJ · mol⁻¹ at the checking temperature; the binding ΔS of BSA and SAMC is 48.89, 46.99 J · mol⁻¹ · K⁻¹ at 298 K and 310 K, respectively. The electrostatic attraction is dominated between BSA and SAMC, based on their ΔH and ΔS . It could be concluded that SAMC has a strong binding with BSA, which provides a theoretical basis for SAMC as a drug molecule. At the same time, these results also provide a theoretical basis for further study of the interaction, development and utilization SAA and other macromolecules.

Keywords S-allyl cysteine; S-allyl cysteine sulfoxid; S-allyl mercapto cysteine; Bovine serum albumin

(Received Jul. 6, 2019; accepted Nov. 13, 2019)

* Corresponding author