

研究论文

分子模拟研究铜、锌与A $\beta$ 肽相互作用中的竞争取代效应

贾卫平, 焦勇, 杨频\*

(山西大学分子科学研究所 化学生物学与分子工程教育部重点实验室 太原 030006)

收稿日期 2006-12-26 修回日期 2007-2-3 网络版发布日期 2007-7-24 接受日期 2007-3-27

**摘要** 以分子模拟方法研究了与A $\beta$ 肽相互作用中铜、锌两种金属离子竞争取代的可能机理. 结果表明, 锌离子不能竞争取代准螺旋配合物[Cu-H13(N $\pi$ )-Y10(OH)], 不影响其聚集抑制作用; 配合物[Zn-H14(N $\tau$ )-V12(CO)]和[Zn-H13(N $\tau$ )-E11(CO)]中的锌离子能被铜离子所取代, 配合物构象无明显变化. 另外, 铜离子还能取代简单桥联模式[H13(N $\tau$ )-Zn-H14(N $\tau$ )]中的锌离子.

**关键词** [锌离子\(II\)](#) [铜离子\(II\)](#) [A \$\beta\$ 肽](#) [竞争取代](#) [分子模拟](#)

分类号

## Molecular Modeling of the Competitive Substitution Effect between Cu<sup>2+</sup> and Zn<sup>2+</sup> in the Interactions with Amyloid $\beta$ -Peptide

JIA Wei-Ping, JIAO Yong, YANG Pin\*

(Institute of Molecular Science, Key Laboratory of Chemical Biology and Molecular Engineering of Ministry of Education, Shanxi University, Taiyuan 030006)

**Abstract** The possible mechanism of the competitive substitution effect between Zn<sup>2+</sup> and Cu<sup>2+</sup> in the interactions with A $\beta$  was investigated for the first time by a molecular modeling method. The results show that Zn<sup>2+</sup> fails to substitute the Cu<sup>2+</sup> in the complex of [Cu-H13(N $\pi$ )-Y10(OH)] with a quasi-helix conformation and thus is of no effect on the inhibition of Cu<sup>2+</sup> on A $\beta$  aggregation. However, in striking contrast to Zn<sup>2+</sup>, Cu<sup>2+</sup> effectively substitutes the Zn<sup>2+</sup> in the complexes of [Zn-H14(N $\tau$ )-V12(CO)] and [Zn-H13(N $\tau$ )-E11(CO)] almost without disturbing the conformation of the complexes. In addition, Cu<sup>2+</sup> may even substitute the Zn<sup>2+</sup> which crosslinks two A $\beta$  strands by the bridge of [H13(N $\tau$ )-Zn-H14(N $\tau$ )].

**Key words** [zinc\(II\)](#) [copper\(II\)](#) [amyloid  \$\beta\$ -peptide](#) [competitive substitution](#) [molecular modeling](#)

DOI:

通讯作者 杨频 [yangpin@sxu.edu.cn](mailto:yangpin@sxu.edu.cn)

扩展功能

本文信息

▶ [Supporting info](#)

▶ [PDF\(367KB\)](#)

▶ [\[HTML全文\]\(0KB\)](#)

▶ [参考文献](#)

服务与反馈

▶ [把本文推荐给朋友](#)

▶ [加入我的书架](#)

▶ [加入引用管理器](#)

▶ [复制索引](#)

▶ [Email Alert](#)

▶ [文章反馈](#)

▶ [浏览反馈信息](#)

相关信息

▶ [本刊中 包含“锌离子\(II\)”的相关文章](#)

▶ 本文作者相关文章

· [贾卫平](#)

· [焦勇](#)

· [杨频](#)