

## $Z_{A\beta 3}$ 和 $A\beta_{16-40}$ 亲和作用的分子机理解析

刘夫锋<sup>1,2,3,4</sup> 范玉波<sup>1</sup> 刘 珍<sup>1</sup> 白 姝<sup>1,\*</sup>

(<sup>1</sup>天津大学化工学院生物工程系, 天津 300072; <sup>2</sup>工业发酵微生物教育部重点实验室, 天津 300457;  
<sup>3</sup>代谢控制发酵技术国家地方联合工程实验室, 天津 300457; <sup>4</sup>天津科技大学生物工程学院, 天津 300457)

## Molecular Mechanism Underlying Affinity Interactions between $Z_{A\beta 3}$ and the $A\beta_{16-40}$ Monomer

LIU Fu-Feng<sup>1,2,3,4</sup> FAN Yu-Bo<sup>1</sup> LIU Zhen<sup>1</sup> BAI Shu<sup>1,\*</sup>

(<sup>1</sup>Department of Biochemical Engineering, School of Chemical Engineering and Technology, Tianjin University, Tianjin 300072, P. R. China; <sup>2</sup>Key Laboratory of Industrial Fermentation Microbiology Ministry of Education, Tianjin 300457, P. R. China; <sup>3</sup>National and Local United Engineering Lab of Metabolic Control Fermentation Technology, Tianjin 300457, P. R. China; <sup>4</sup>College of Biotechnology, Tianjin University of Science & Technology, Tianjin 300457, P. R. China)

\*Corresponding author. Email: sbai@tju.edu.cn; Tel: +86-22-27404981.

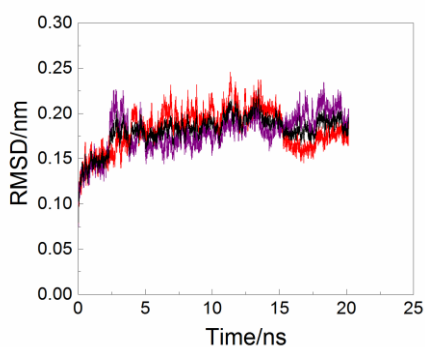


图 S1 三条 MD 模拟轨迹中  $Z_{A\beta 3}$  与  $A\beta_{16-40}$  复合物非氢原子与其初始结构的均方根偏差随模拟时间变化

Fig.S1 Root-mean-square deviation (RMSD) from the initial structure for non-hydrogen atoms as a function of time in three MD trajectories.

表 S1  $Z_{A\beta 3}$ - $A\beta_{16-40}$  复合物中  $Z_{A\beta 3}$  中各氨基酸残基结合自由能的贡献( $\text{kJ}\cdot\text{mol}^{-1}$ )

Table S1 Free energy decomposition of residues of  $Z_{A\beta 3}$  for  $A\beta_{16-40}$  of the  $Z_{A\beta 3}$ - $A\beta_{16-40}$  complex ( $\text{kJ}\cdot\text{mol}^{-1}$ ).

	$Z_{A\beta 31}:A\beta_{16-40}$	$Z_{A\beta 32}:A\beta_{16-40}$
E15	-12.98	14.40
I16	-16.24	-21.77
V17	-23.99	-23.66
Y18	-54.89	-23.45
L19	-24.41	-22.82
P20	-33.66	-24.49
N21	-12.43	-6.82
L22	-11.85	-5.36
N23	-0.04	1.09
P24	-0.59	-0.08
D25	6.87	4.69
Q26	-0.63	0.29
L27	-3.68	-4.98
C28	-1.17	-1.09
A29	-0.04	-0.17
F30	-5.44	-2.22
I31	-6.78	-4.61
H32	-0.13	1.09
S33	0.96	0.04

L34	-5.90	-3.43
H35	4.02	-7.49
D36	0.08	0.54
D37	-0.25	0.54
P38	-3.27	-11.35
S39	-0.92	-0.80
Q40	0.25	-0.92
S41	2.81	-10.05
A42	-0.71	-8.21
N43	-0.08	1.93
L44	0.25	-0.25
L45	-6.49	-13.15
A46	0.04	-0.96
E47	-0.08	-0.13
A48	0.42	0.29
K49	2.76	-1.80
K50	-0.08	-0.33
L51	0.04	0.13
N52	-3.52	-2.97
D53	0	0.42
A54	-0.08	0.04
Q55	0	-0.33
A56	-4.98	0.71

表 S2 复合物中(a)  $Z_{A\beta 31}$  和(b)  $Z_{A\beta 32}$  氨基酸残基的主链和侧链对  $A\beta_{16-40}$  结合自由能分解 ( $\text{kJ}\cdot\text{mol}^{-1}$ )  
**Table S2 Decomposition of the total energetic contribution by residue of (a)  $Z_{A\beta 31}$  and (b)  $Z_{A\beta 32}$  for  $A\beta_{16-40}$  in the  $Z_{A\beta 31}$ - $A\beta_{16-40}$  complex ( $\text{kJ}\cdot\text{mol}^{-1}$ ).**

	$Z_{A\beta 31}$		$Z_{A\beta 32}$	
	backbone	side chain	backbone	side chain
E15	-14.03	-1.30	-0.33	13.57
I16	-8.00	-8.12	-11.26	-10.47
V17	-19.72	-4.35	-20.16	-3.56
Y18	-9.17	-46.10	-9.13	-14.24
L19	-18.17	-6.20	-15.49	-7.24
P20	-32.49	-0.25	-16.41	-6.78
N21	-0.21	-12.14	-0.13	-6.70
L22	-11.85	-0.04	-5.44	0.08
N23	0.63	-0.71	0.77	0.29
P24	-1.97	2.47	-0.67	1.30
D25	-0.04	7.20	0.04	4.81
Q26	-0.08	-0.50	-0.08	0.38
L27	0.21	-4.02	0.04	-5.07

C28	0	-0.96	-0.08	-0.80
A29	-0.04	0	0	-0.17
F30	-0.29	-5.23	0.13	-2.34
I31	-1.38	-5.48	0.29	-4.98
H32	-0.04	-0.21	-0.17	1.38
S33	0.54	0.42	0.04	0.00
L34	-2.01	-3.98	2.09	-5.61
H35	-0.46	4.23	0.84	-8.25
D36	-0.21	0.33	0.75	-0.13
D37	-0.21	-0.08	-2.18	2.68
P38	-5.65	2.76	-0.59	-10.13
S39	-0.75	-0.14	-0.54	-0.25
Q40	0.25	0	-0.38	-0.54
S41	1.42	1.26	-3.35	-6.74
A42	-0.67	-0.04	-5.90	-2.34
N43	-0.08	0	1.55	0.38
L44	0.17	0.08	-0.29	0.04
L45	-0.04	-6.49	-2.60	-10.59
A46	0.04	0	-0.59	-0.38
E47	0.13	-0.17	0	-0.13
A48	0.46	-0.08	0.25	0.04
K49	0.13	2.43	0	-1.67
K50	0.07	-0.15	0	-0.38
L51	0	0.04	-0.04	0.17
N52	-0.17	-3.31	0.21	-3.10
D53	-0.08	0.17	0	0.42
A54	0	-0.04	0	0.04
Q55	-1.26	1.26	-0.92	0.59
A56	-4.73	-0.29	1.09	-0.33

表 S3 复合物中(a)  $Z_{A\beta 31}$  和(b)  $Z_{A\beta 32}$  氨基酸残基对  $A\beta_{16-40}$  的结合自由能分解( $\text{kJ}\cdot\text{mol}^{-1}$ )  
 Table S3 Decomposition of the total energetic contribution by residues of (a)  $Z_{A\beta 31}$  and (b)  $Z_{A\beta 32}$  for  $A\beta_{16-40}$   
 in the  $Z_{A\beta 31}$ - $A\beta_{16-40}$  complex ( $\text{kJ}\cdot\text{mol}^{-1}$ ).

	$Z_{A\beta 31}$			$Z_{A\beta 32}$		
	elec	vdw	sas	elec	vdw	sas
E15	-5.82	-6.53	-0.67	19.59	-4.27	-0.92
I16	-5.07	-9.92	-1.26	-8.00	-12.35	-1.42
V17	-16.54	-6.82	-0.67	-19.30	-3.89	-0.46
Y18	-41.03	-11.56	-2.30	-4.90	-16.20	-2.30
L19	-13.86	-9.67	-0.88	-11.56	-10.38	-0.84
P20	-27.13	-5.53	-1.00	-15.20	-7.75	-1.55
N21	-11.64	-0.84	0	-5.99	-0.92	0.13

L22	-11.18	-0.67	0	-4.94	-0.38	-0.04
N23	0.17	-0.13	-0.08	1.21	-0.08	-0.08
P24	1.59	-0.21	-1.93	1.97	-0.17	-1.88
D25	7.12	0	-0.25	5.07	0.00	-0.33
Q26	-0.59	-0.04	-0.04	-0.08	-0.04	0.38
L27	1.30	-3.85	-1.09	0.50	-4.31	-1.21
C28	0.33	-0.13	-1.38	0.17	-0.08	-1.17
A29	0	0	0	0	0	-0.17
F30	-0.08	-4.98	-0.38	0.38	-2.26	-0.33
I31	-0.38	-3.85	-2.55	1.00	-3.60	-2.01
H32	0.96	-0.04	-1.00	1.97	-0.04	-0.84
S33	1.00	-0.04	0.04	0.29	0	-0.21
L34	-0.33	-4.77	-0.84	3.01	-5.69	-0.71
H35	5.07	-0.21	-0.88	-3.52	-3.31	-0.67
D36	-0.08	0	0.17	0.80	-0.04	-0.21
D37	-0.21	-0.04	0	0.92	-0.33	-0.04
P38	-2.43	-0.50	-0.04	-2.22	-7.49	-1.63
S39	-0.96	-0.04	0.08	0.29	-0.88	-0.21
Q40	0.29	-0.04	0	-0.21	-0.21	-0.50
S41	5.86	-2.55	-0.50	-4.06	-5.28	-0.71
A42	0.08	-0.75	-0.04	-5.53	-2.26	-0.46
N43	-0.04	-0.04	0.00	2.05	-0.08	-0.04
L44	0.63	-0.33	-0.04	-0.04	-0.17	-0.04
L45	1.17	-6.62	-1.05	-4.81	-7.29	-1.05
A46	0.04	-0.04	0.04	-0.67	-0.04	-0.21
E47	0.21	0	-0.25	0.13	0	-0.25
A48	0.67	-0.25	-0.04	0.38	-0.08	0
K49	3.18	-0.25	-0.17	-1.63	-0.04	-0.08
K50	0.13	0	-0.17	0	0	-0.33
L51	0.04	0	0	0	0	0.13
N52	-3.48	-0.13	0.04	-2.76	-0.21	0
D53	0.08	0	-0.08	0.38	0	0
A54	0	0	-0.08	0	0	0.04
Q55	-0.38	0	0.38	-0.59	0	0.25
A56	-4.77	0	-0.21	0.84	-0.04	-0.04