
研究揭示纳米材料表面化学在蛋白腔体识别中的作用机制

作者：writer 来源：中国科学院

本文原地址：<https://www.iikx.com/news/progress/37830.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！

研究揭示纳米材料表面化学在蛋白腔体识别中的作用机制

。蛋白间相互作用界面的蛋白表面腔体在细胞信号调控和病毒入侵等过程中具有重要功能，但其结构浅、尺度较大，长期被认为难以通过传统小分子实现稳定靶向，成为限制相关调控策略发展的重要瓶颈。

近日，中国科学院深圳先进技术研究院系统揭示了纳米材料靶向蛋白表面腔体的分子识别机制。研究以SARS-CoV-2刺突蛋白为模型体系，选取尺寸高度一致但表面化学性质不同的CeO₂ NPs和金纳米颗粒，在严格控制尺寸变量的前提下，系统比较了纳米材料表面化学性质对蛋白腔体靶向行为的影响。结果显示，两类纳米颗粒均可通过与刺突蛋白结合发挥抗病毒作用，但其结合位点和分子机制存在显著差异。CeO₂ NPs倾向于靶向富含天冬氨酸（Asp）残基的中央腔体，通过与Asp羧基之间的配位作用实现稳定结合，从而阻断S蛋白与宿主细胞ACE2受体的识别过程。而AuNPs主要结合富含精氨酸（Arg）残基的侧向腔体，依赖与Arg的静电作用和氢键相互作用，靠近S1/S2酶切位点区域，干扰宿主蛋白酶介导的刺突蛋白激活过程。

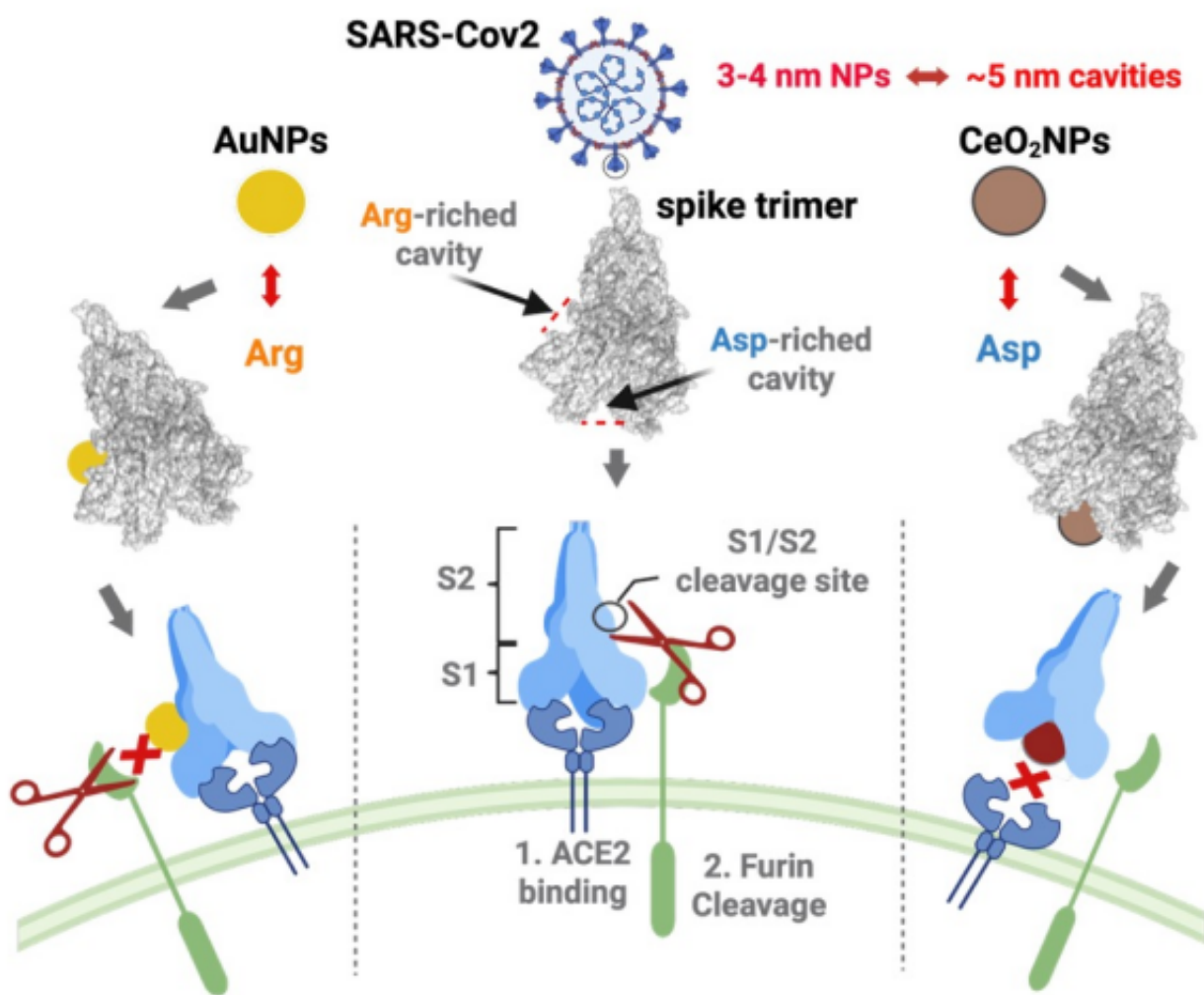
研究发现，在几何尺寸可达的前提下，纳米颗粒对蛋白腔体的选择性靶向并非由尺寸单一因素决定，而是由材料表面化学性质与腔体局部氨基酸残基所构成的微环境之间的相互作用方式所主导。只有同时满足“结构几何匹配”与“表面化学匹配”两个条件，才能实现对特定蛋白腔体的精准识别与功能调控。

研究从分子和界面层面系统阐明了“残基驱动的腔体特异性识别机制”。机制在尺寸匹配等结构因素的基础上，引入残基微环境这一关键分子维度，进一步细化并完善了纳米材料—靶蛋白相互作用的分子识别机制，为理解复杂蛋白表面局部结构的选择性结合提供了明确且可推广的物理化学依据。相关结果为纳米材料靶向调控蛋白功能提供了可操作的设计原则，也为突破传统小分子难以调控的“不可成药”蛋白腔体建立了具有普适意义的理论框架。

相关研究成果发表在《美国化学会志》（Journal of the American Chemical Society

）上。研究工作得到国家自然科学基金、科技部重点研发计划、广东省自然科学基金等的支持。

[论文链接](#)



氨基酸残基驱动的尺寸匹配纳米颗粒对SARS-CoV-2刺突蛋白腔体的选择性靶向机制

研究团队单位：深圳先进技术研究院

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

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