蛋白-蛋白对接实验案例报告

1 实验目的

分子对接评估 HMGB1（UniProt ID P09429）蛋白 BECN1（PDB ID 8SOR）蛋白的结合情况。

2 实验方法

2.1 蛋白质结构获取与建模

为了进行分子对接，首先需要获取实验蛋白的三维结构。蛋白 BECN1 有完整的冷冻电镜解析三维结构。由于蛋白 HMGB1 没有实验解析的结构，采用了 AlphaFold 3 方法根据其氨基酸序列进行建模。HMGB1 的 pTM 得分为 0.83，表示较高质量的结构预测 [1]。

2.2 HDOCK 分子对接

采用 HDOCK 软件进行分子对接分析，参数设置如下：Grid spacing：1.200，Angle step：15.00 [2]。分别输入 HMGB1 与 BECN1 的 PDB 文件，量化结合能评估 HMGB1 与 BECN1 蛋白之间的亲和力。

2.3 结果可视化与分析

使用 PYMOL 软件可视化分析 HMGB1 与 BECN1 的最佳结合构象。通过标注氨基酸残基之间的连接，进一步分析两者之间的相互作用。

3 结果分析

3.1 分子对接结果

通过分子对接计算得到 HMGB1 与 BECN1 的最佳结合能为-314.03 kcal/mol。在 HDOCK 分析中，结合能数值通常以 kcal/mol 为单位表示，数值越低（负值越大），代表结合更稳定，亲和力更高，数值的大小可以作为评价结合强度的重要参考。

3.2 氨基酸相互作用分析

通过 PYMOL 对最佳结合构象进行可视化分析后，我们发现在 HMGB1-BECN1 复合物中，多个氨基酸间通过氢键和疏水相互作用紧密结合，进一步验

此报告为耀淼生物案例报告，仅供客户参考，禁止用于非法用途

证了较强的结合能。如图所示，在最佳构象中 HMGB1（粉色）与 BECN1（绿色）的接触区域主要集中在标记的黄色区域，这些氨基酸通过氢键相连，无二硫键和其他共价键。

所有非共价键长度均小于 4.0 Å，表明这些相互作用非常强，能有效增强蛋白质的结构稳定性和功能。氢键的距离通常会影响它们的相互作用强度。较短的相互作用距离（通常小于 3.5 Å）会导致更强的相互吸引，因为这种距离使得电子云的重叠程度较高，增强了氢键的作用力。对于氢键，通常小于 3.5 Å 被认为是最佳的距离范围，此时氢键强度最大。非共价键连接的氨基酸在蛋白质表面具有高可及性，且其化学性质有助于稳定两者的结合。

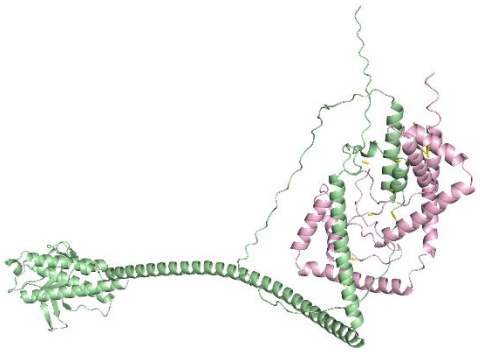
4 参考文献

[1] Abramson J, Adler J, Dunger J, et al. Accurate structure prediction of biomolecular interactions with AlphaFold 3. Nature. 2024;630(8016):493-500.

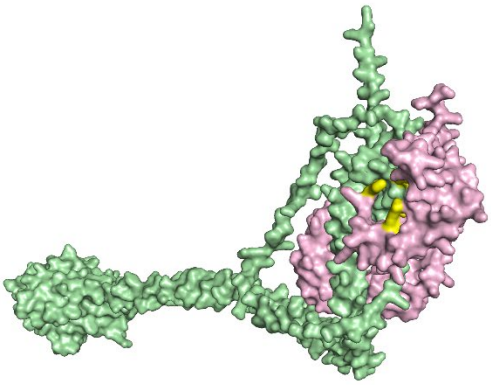
[2] Yan Y, Tao H, He J, Huang SY. The HDOCK server for integrated protein-protein docking. Nat Protoc. 2020;15(5):1829-1852.

此报告为耀淼生物案例报告，仅供客户参考，禁止用于非法用途

附件 1：HMGB1- BECN1 卡通图

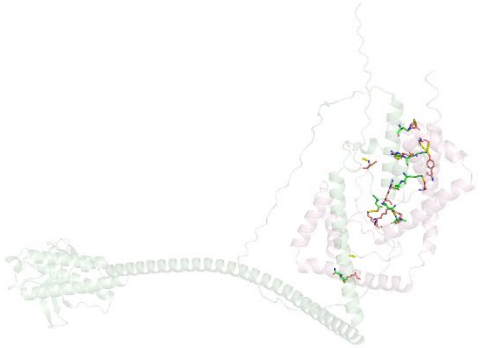


附件 2：HMGB1- BECN1 表面结构图

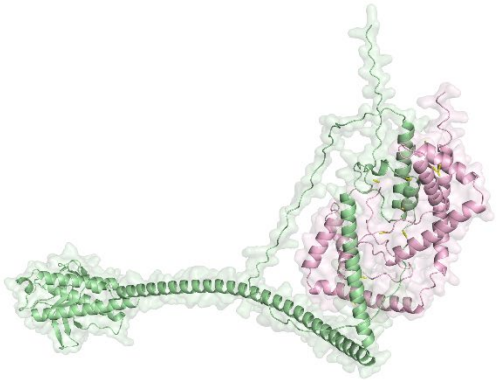


此报告为耀淼生物案例报告，仅供客户参考，禁止用于非法用途

附件 3：HMGB1- BECN1 大体图

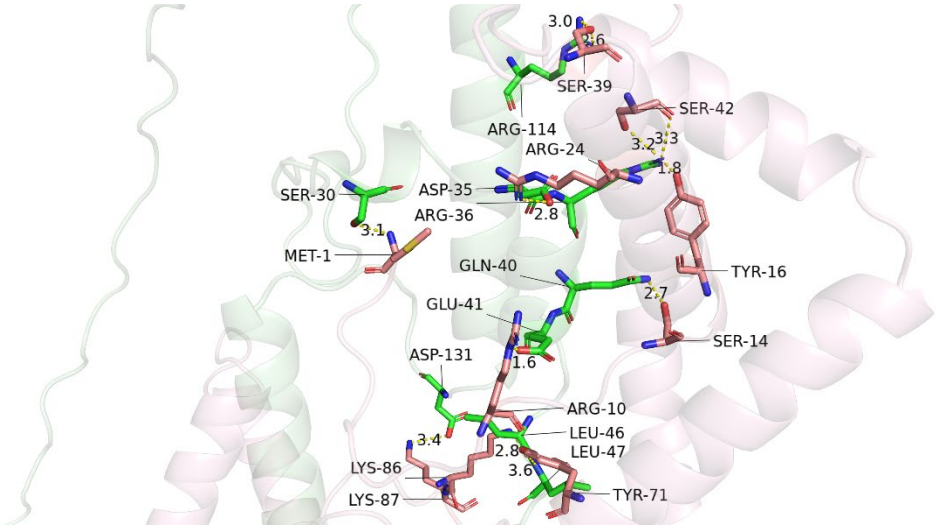


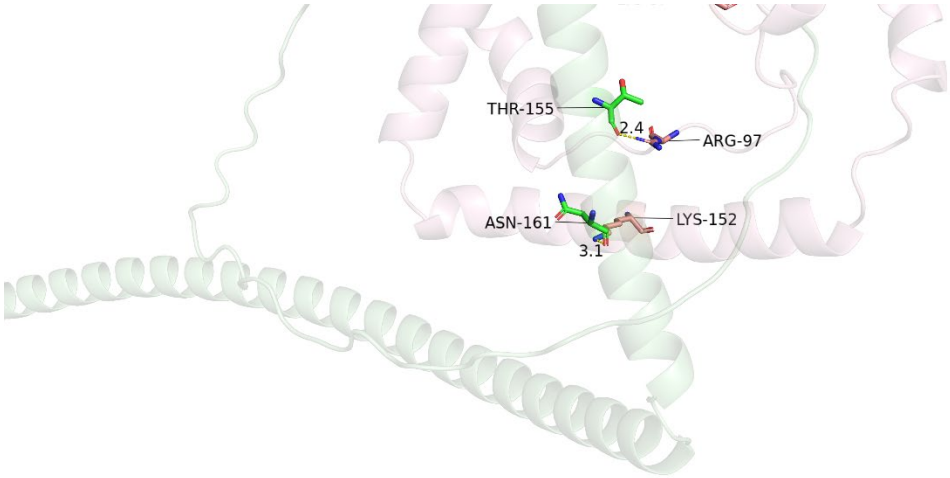
附件 4：HMGB1- BECN1 透视图



此报告为耀淼生物案例报告，仅供客户参考，禁止用于非法用途

附件 5：HMGB1- BECN1 细节图





此报告为耀淼生物案例报告，仅供客户参考，禁止用于非法用途

附件 6：HMGB1- BECN1 整体组图

