



中国农业科学院

CHINESE ACADEMY OF AGRICULTURAL SCIENCES

Sequence and Structure Comparison of *Lysozyme C* in Animals across Different Ecological Environments

不同生态环境下动物溶菌酶C的序列与结构比较

G11成员:伍绍斌, 郑钧元, 傅伊健, 冯闯

报告人:郑钧元

2026.01

成员分工



团队分工

伍绍斌：聚类热图、分子模拟对接
郑钧元：序列保守性比对、结构分析
冯闯：发育进化树、序列收集
傅伊健：序列收集、整合美化PPT

contents



背景



系统发育树分析



聚类分析



结构分析



总结

contents



背景



系统发育树分析



聚类分析



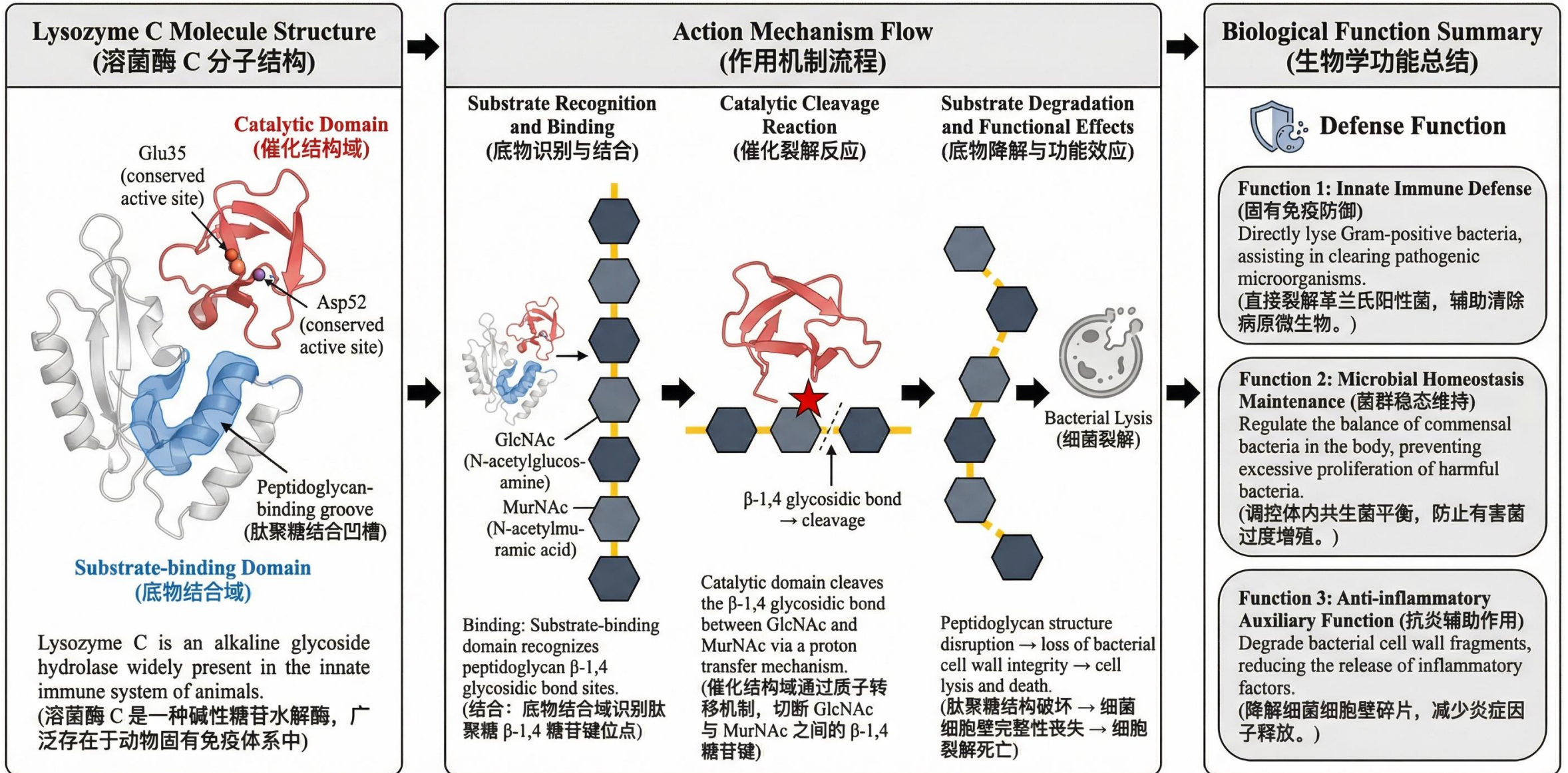
结构分析



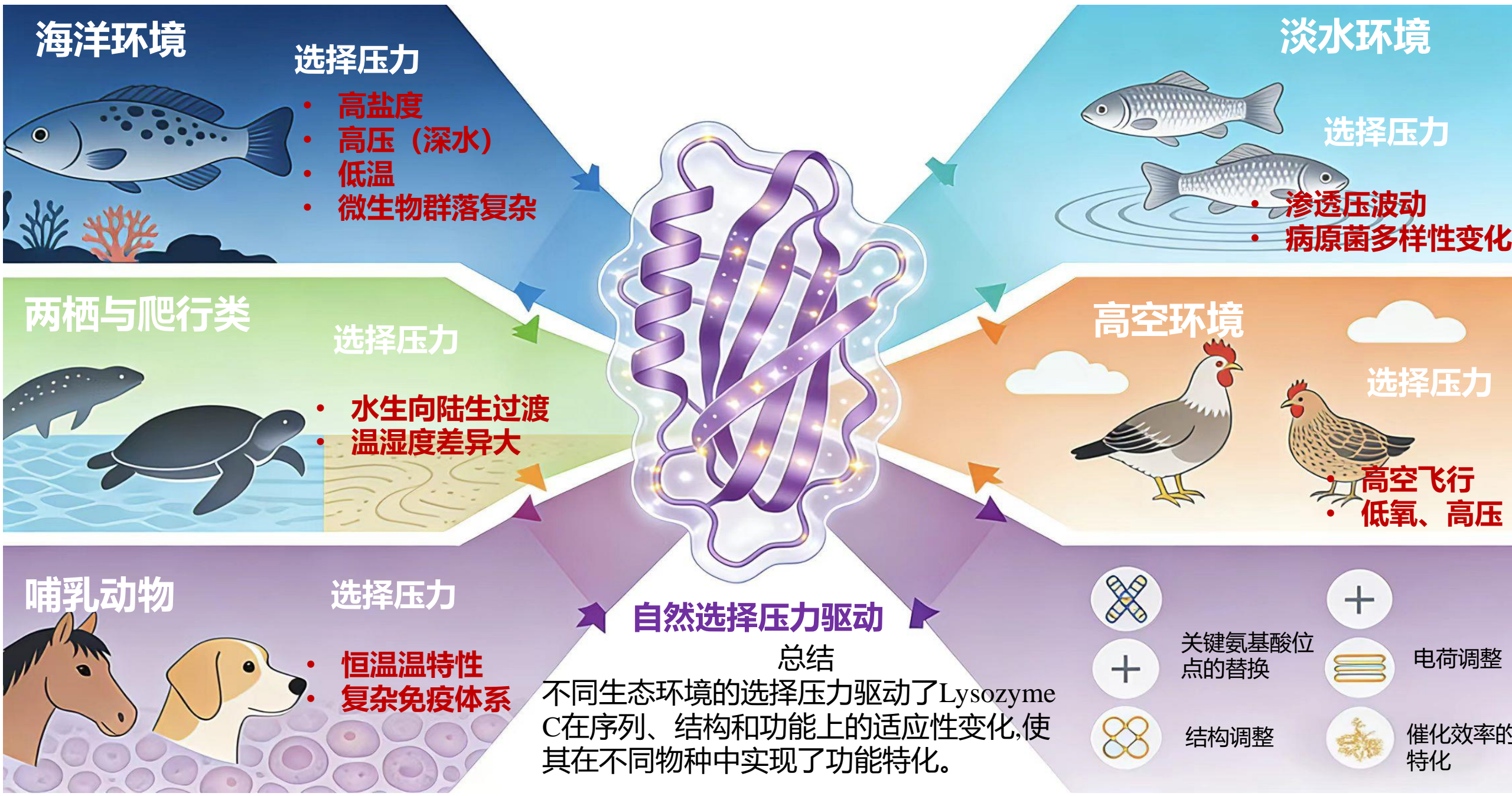
总结

Lysozyme C的重要性和作用机制

Lysozyme C: Core Structure, Action Mechanism and Biological Functions



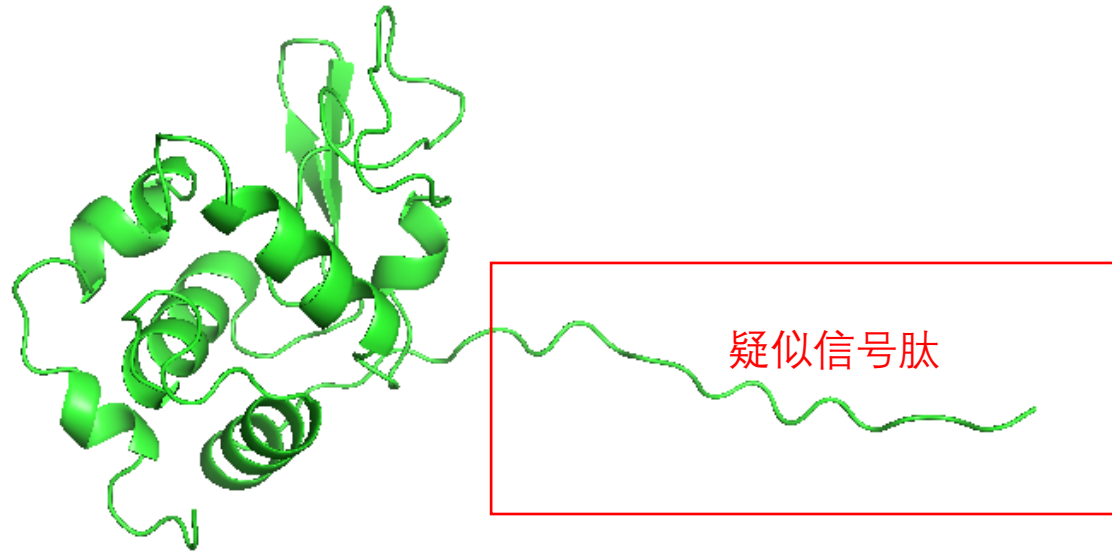
C型溶菌酶 (LYZ) 随着生态环境适应性分化



序列的收集和处理



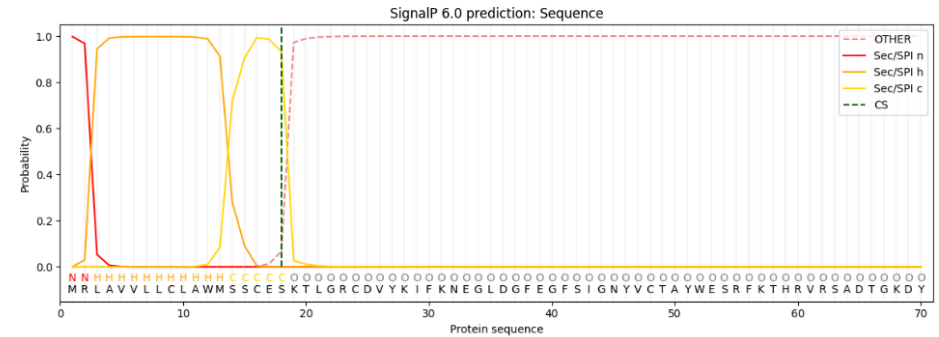
SignalP 6.0 - DTU Health Tech -
Bioinformatic Services



Sequence
Prediction: Signal Peptide (Sec/SPI)
Cleavage site between pos. 18 and 19.
Probability 0.932273

Protein type	Other	Signal Peptide (Sec/SPI)	Lipoprotein signal peptide (Sec/SPII)	TAT signal peptide (Tat/SPI)	TAT Lipoprotein signal peptide (Tat/SPII)	Pilin-like signal peptide (Sec/SPIII)
Likelihood	0.0005	0.9958	0.003	0.0002	0.0002	0.0002

Download: [PNG](#) / [EPS](#) / [Tabular](#)



我们前期在UNIPORT及NCBI进行序列收集并预测蛋白模型后，发现在**N端含有一段较长的尾巴，疑似为信号肽**。于是我们进行了信号肽的预测，并人工进行了信号肽序列的切割

contents



背景



系统发育树分析



聚类分析

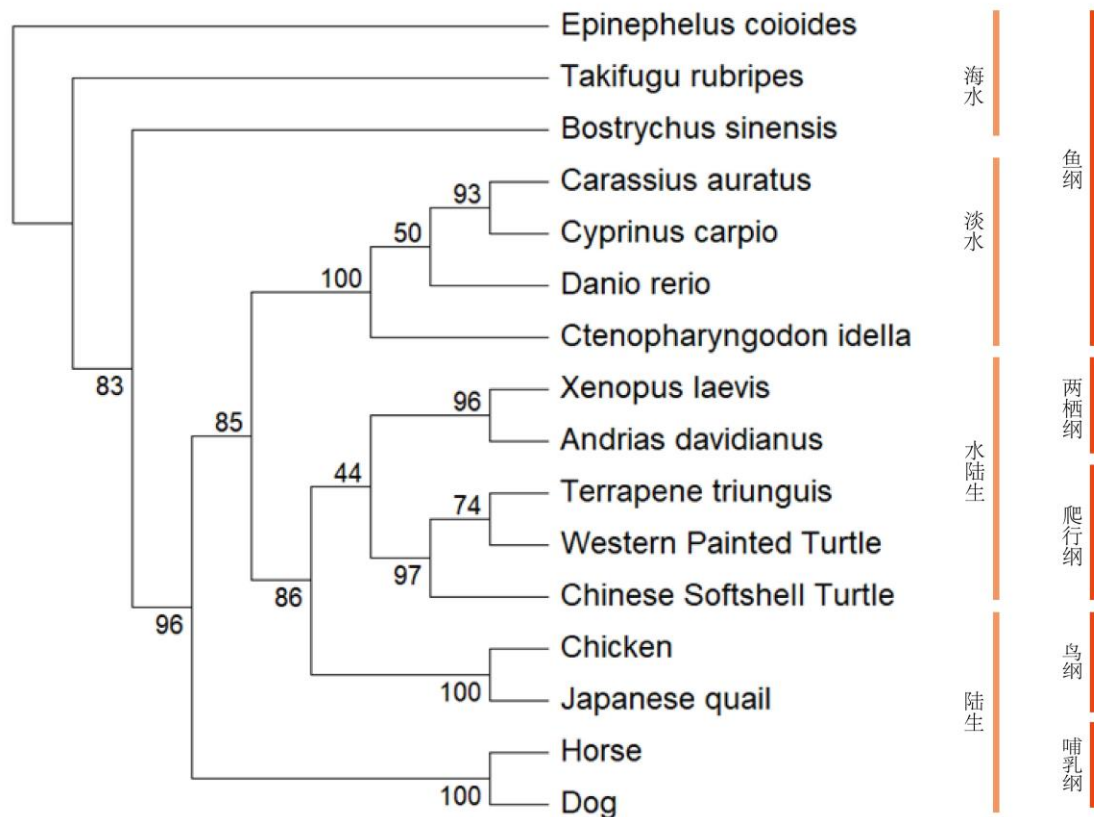


结构分析



总结

系统发育树分析



- 结合系统发生树的结构和16个物种的关系，可以看出溶菌酶C基因的演化关系与物种的进化关系并不相同。
- 在系统发生树中，16个物种因为生活环境的不同（海水、淡水、水陆、陆生），形成不同分支，这可能是因为如外界环境渗透压、pH、氧气含量等因素改变带来的选择压力作用于溶菌酶C序列的结果。
- 在系统发生树中，哺乳动物形成的独立分支，表明极端或独特生态环境可能引起基因异常快速进化与趋异。

contents



背景



系统发育树分析



聚类分析

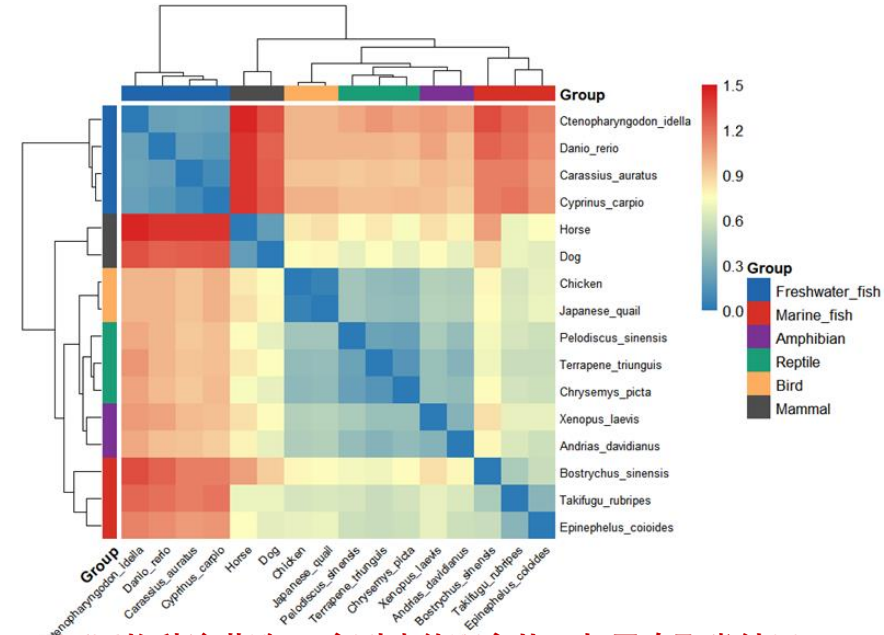


结构分析



总结

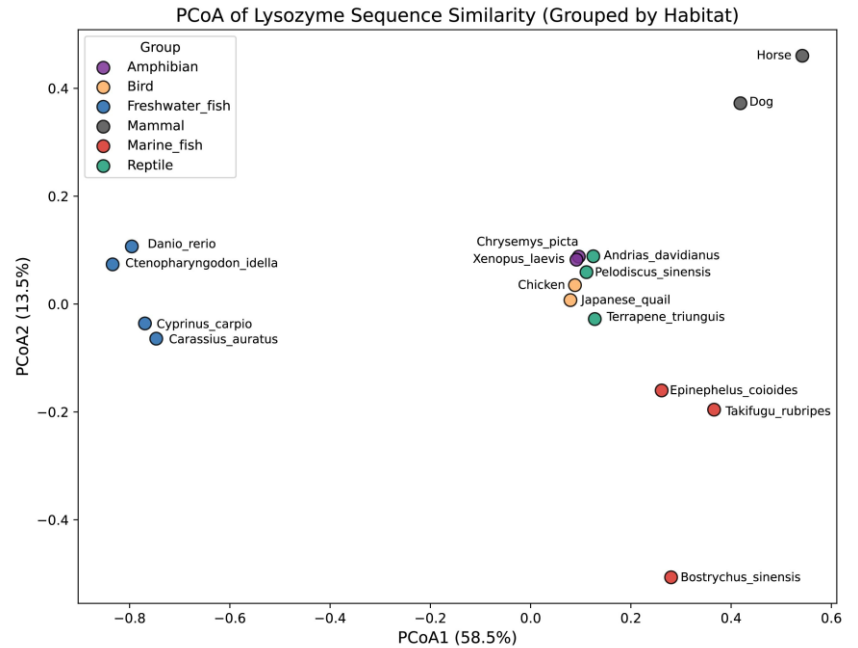
聚类分析



- 颜色由蓝到红表示遗传距离从小到大，对角线为同一物种的零距离（数值一致性验证）
- 层次聚类树显示，淡水鱼类、海水鱼类、陆生脊椎动物（爬行类、鸟类、哺乳类）分别形成**独立分支**。
- 表明不同生态类群间存在显著遗传分化，结果具有良好生物学合理性。

不同物种溶菌酶 C 序列遗传距离热图与层次聚类结果

- 横轴 PCoA1 解释 58.5% 的序列变异，纵轴 PCoA2 解释 13.5% 的变异；样本点间距离越近，序列相似性越高。
- 结果显示，淡水鱼与其他类群在 PCoA1 方向上明显分离，哺乳类位于右上区域，与鱼类及其他类群差异较大；海水鱼在 PCoA2 上离散度较高并存在离群点。相比之下，两栖类、爬行类与鸟类在前两轴上高度重叠，未呈现清晰分群，提示溶菌酶 C 序列的差异在二维空间中主要反映了鱼类（淡水/海水）与哺乳类的分化，而其他类群需结合更多分析才能进一步区分。



基于溶菌酶 C 序列相似性的 PCoA 分析（按生态栖息地分组）

contents



背景



系统发育树分析



聚类分析



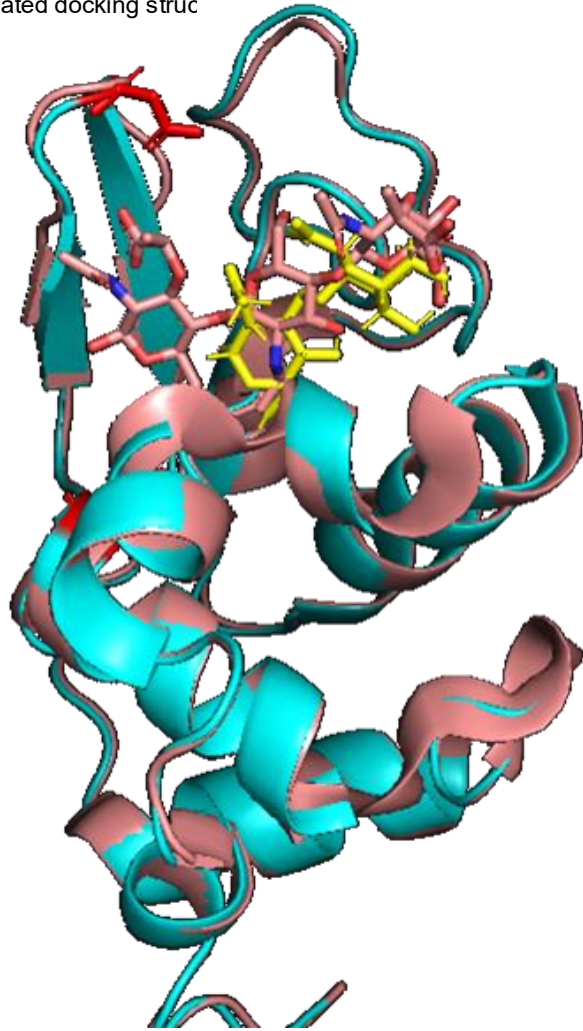
结构分析



总结

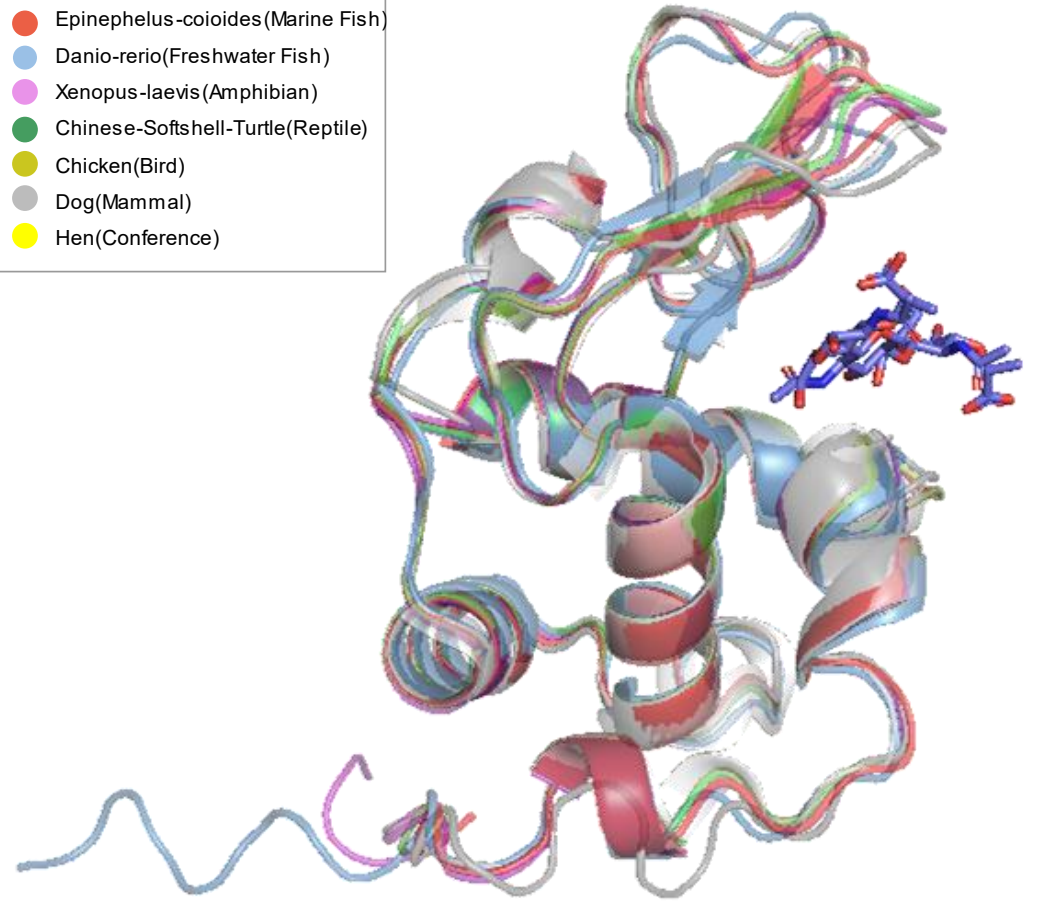
不采取模拟对接策略，而使用同源进行对接

- native docking structure
- simulated docking struc



真实对接与模拟对接，对接结果差异大
可信度较低

- Epinephelus-coioides(Marine Fish)
- Danio-erio(Freshwater Fish)
- Xenopus-laevis(Amphibian)
- Chinese-Softshell-Turtle(Reptile)
- Chicken(Bird)
- Dog(Mammal)
- Hen(Conference)



6个蛋白与参考蛋白（人类）活性口袋结构相似，
同源比对结果可信度高

预测活性口袋

工具：
ProtScale

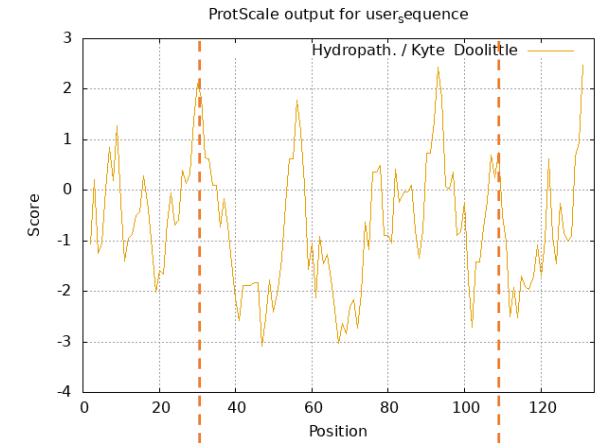
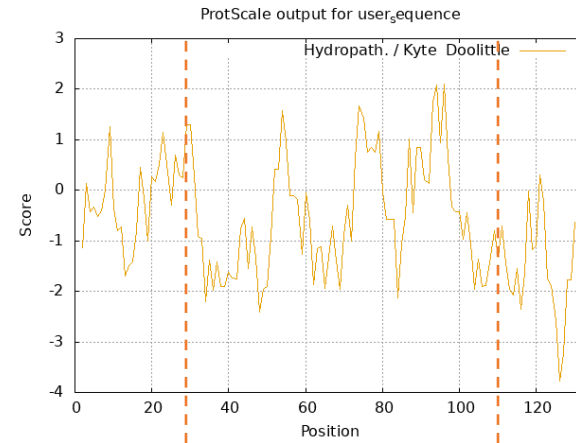
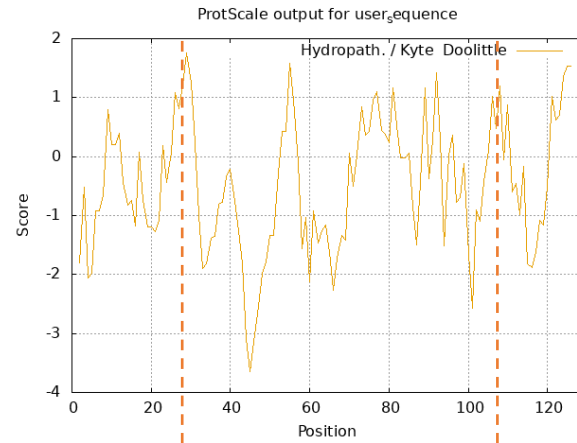
活性口袋的特征：疏水 - 亲水过渡区
活性位点的特征：活性口袋内富集的高极性残基

Epinephelus coioides-LYZ

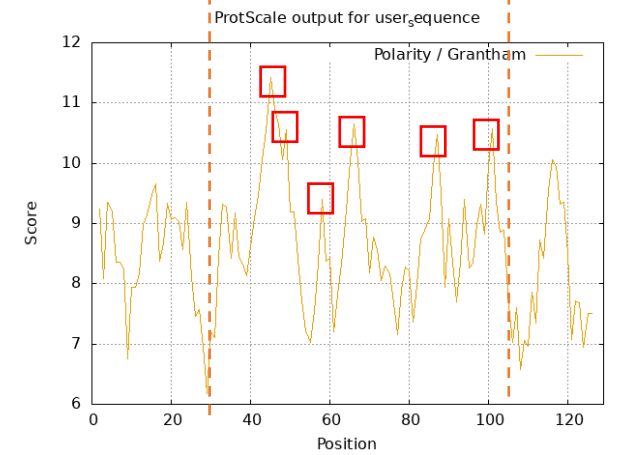
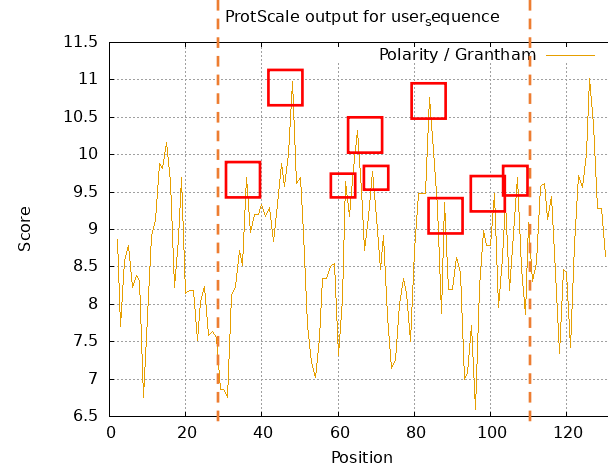
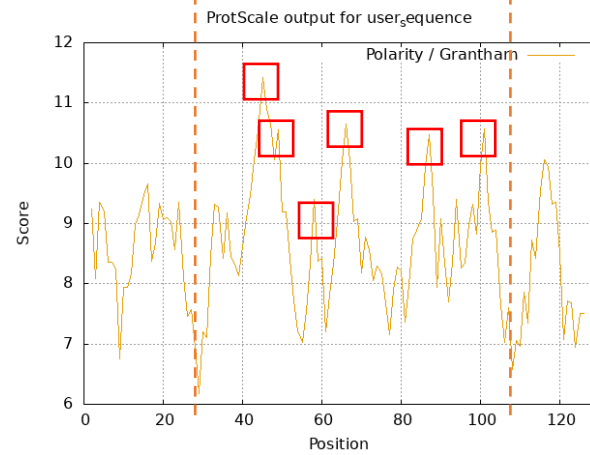
Danio rerio-LYZ

Xenopus laevis-LYZ

疏水性分析



极性分析



活性口袋基本都在30-110AA之间

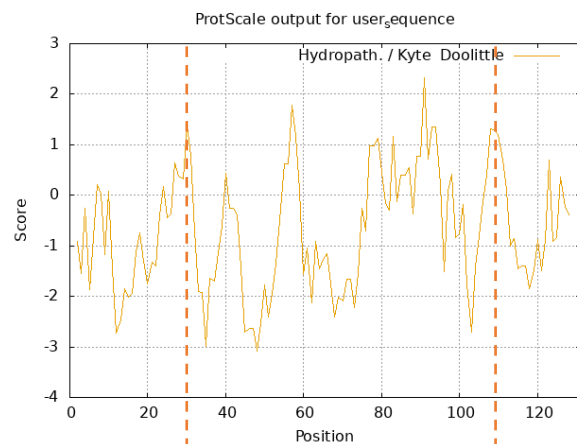
预测活性口袋

活性口袋的特征：疏水 - 亲水过渡区
活性位点的特征：活性口袋内富集的高极性残基

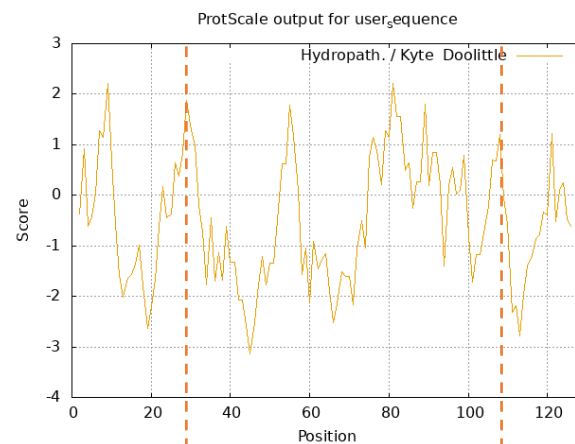
工具：
ProtScale

疏水性分析

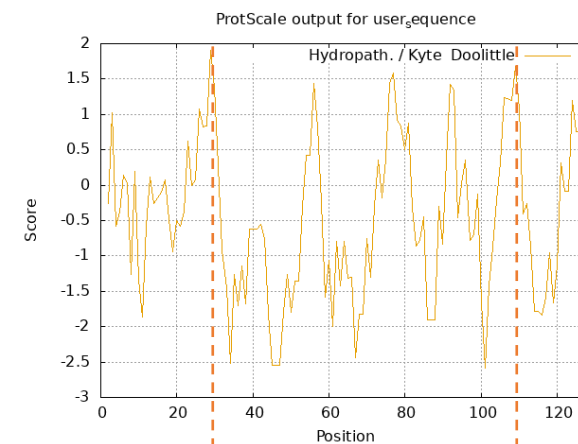
Chinese Softshell Turtle-LYZ



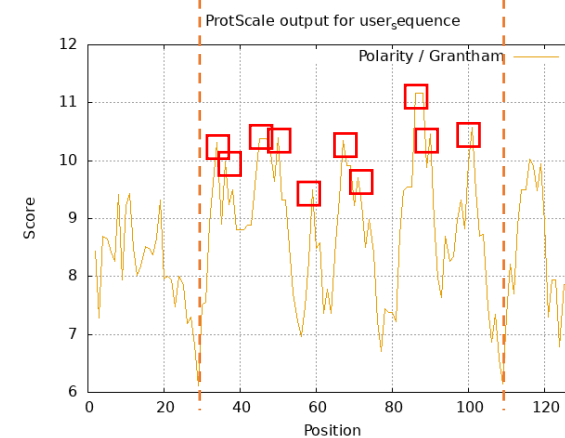
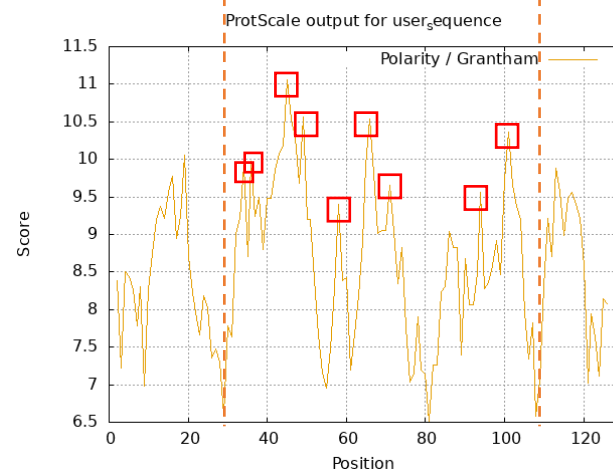
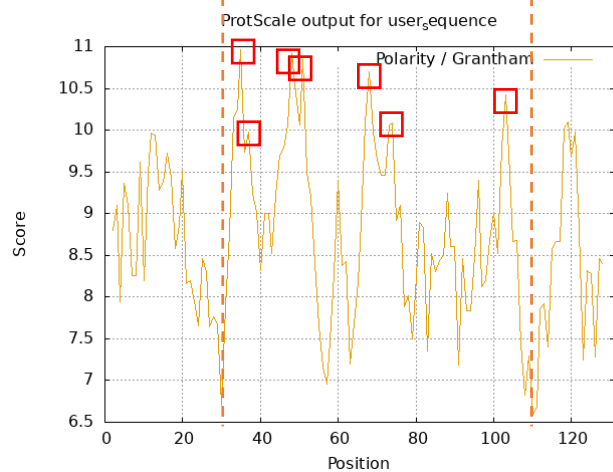
Chicken-LYZ



Dog-LYZ



极性分析



活性口袋基本都在30-110AA之间

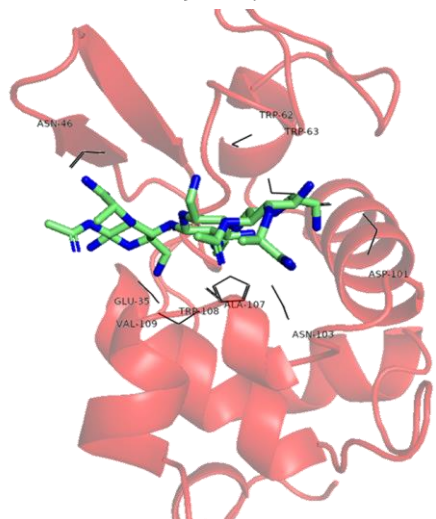
活性位点保守性分析

- conserved active site
- partially conserved active site
- non-conserved active site

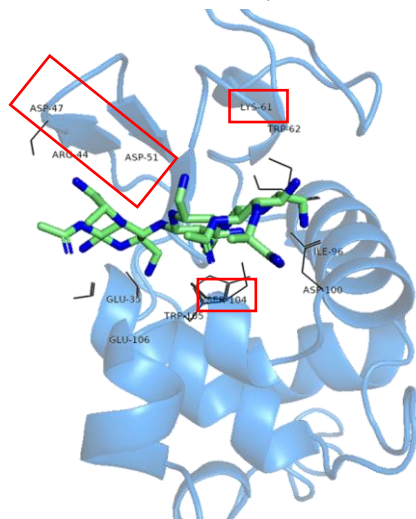
Ctenopharyngodon	-	R	T	M	G	R	C	E	V	V	K	I	F	R	A	E	G	L	D	G	F	E	G	F	S	L	G	N	Y	V	C	T	A	Y	W	E	S	R	F	K	T	Q	R	V	R	T	-	-	A	D	V	G	K	D	Y	G	I	F	Q	I	N	S	F	K	61
Danio	-	K	T	L	G	R	C	D	V	Y	K	I	F	K	N	E	G	L	D	G	F	E	G	F	S	I	G	N	Y	V	C	T	A	Y	W	E	S	R	F	K	T	H	R	V	R	S	-	-	A	D	T	G	K	D	Y	G	I	F	Q	I	N	S	F	K	61
Carassius	-	R	R	L	G	R	C	D	V	A	R	I	F	K	R	E	G	L	D	G	F	E	G	F	S	L	G	N	Y	V	C	T	A	Y	W	E	S	K	Y	K	T	H	R	V	R	S	-	-	A	D	V	G	K	D	Y	G	I	F	Q	I	N	S	F	K	61
Cyprinus	-	R	R	L	K	R	C	D	V	V	R	I	F	K	Q	E	G	L	D	G	F	E	G	F	S	V	G	N	Y	V	C	T	A	Y	W	E	S	R	F	K	T	H	R	V	R	S	-	-	A	D	T	G	K	D	Y	G	I	F	Q	I	N	S	F	K	61
Horse	-	K	V	F	S	K	C	E	L	A	H	K	L	K	A	Q	E	M	D	G	F	G	G	Y	S	L	A	N	W	V	C	M	A	E	Y	E	S	N	F	N	T	R	A	F	N	G	K	N	A	N	G	S	S	D	Y	G	I	F	Q	L	N	N	K	W	63
Dog	-	K	I	F	S	K	C	E	L	A	R	K	L	K	S	M	G	M	D	G	F	H	G	Y	S	L	A	N	W	V	C	M	A	E	Y	E	S	N	F	N	T	Q	A	F	N	G	R	N	S	N	G	S	S	D	Y	G	I	F	Q	L	N	S	K	W	63
Chicken	-	K	V	F	G	R	C	E	L	A	A	A	M	K	R	H	G	L	D	N	Y	R	G	Y	S	L	G	N	W	V	C	A	A	K	F	E	S	N	F	N	T	Q	A	T	N	R	N	-	T	D	G	S	T	D	Y	G	I	L	Q	I	N	S	R	W	62
Japanese	-	K	V	Y	G	R	C	E	L	A	A	A	M	K	R	H	G	L	D	K	Y	Q	G	Y	S	L	G	N	W	V	C	A	A	K	F	E	S	N	F	N	T	Q	A	T	N	R	N	-	T	D	G	S	T	D	Y	G	I	L	Q	I	N	S	R	W	62
Chinese	G	K	I	Y	E	Q	C	E	L	A	R	E	F	K	R	H	G	M	D	G	Y	H	G	Y	S	L	G	D	W	V	C	T	A	K	H	E	S	N	F	N	T	A	A	T	N	Y	N	R	G	D	Q	S	T	D	Y	G	I	L	Q	I	N	S	R	W	64
Terrapene	-	K	I	Y	E	R	C	E	L	A	R	A	M	K	R	L	G	L	D	G	Y	R	G	Y	S	L	G	H	W	V	C	T	A	R	Y	E	S	G	F	N	T	G	A	T	N	Y	N	P	G	D	R	S	T	D	Y	G	I	L	Q	I	N	S	R	W	63
Western	-	K	V	Y	G	R	C	E	L	A	R	A	M	K	R	L	G	L	D	G	Y	R	G	Y	S	L	G	H	W	V	C	T	A	R	Y	E	S	N	F	N	T	G	A	T	N	Y	N	R	G	D	Q	S	T	D	Y	G	I	F	Q	I	N	S	R	W	63
Xenopus	-	K	L	F	E	R	C	E	L	A	G	T	M	K	K	M	G	L	D	G	Y	R	G	Y	S	L	P	N	W	V	C	T	A	F	F	E	S	S	F	Y	T	D	R	T	N	F	N	R	G	D	N	S	T	D	Y	G	I	L	Q	I	N	S	R	W	63
Andrias	-	K	I	F	E	R	C	E	L	A	G	V	M	K	M	L	G	L	D	G	Y	R	G	Y	S	L	P	N	W	V	C	T	A	N	Y	E	S	S	F	N	T	R	A	T	N	F	N	R	G	D	N	S	T	D	Y	G	I	L	Q	I	N	S	H	W	63
Bostrychus	-	T	I	F	E	R	C	Q	W	A	R	L	L	K	S	R	G	M	G	G	Y	Q	G	I	S	L	G	D	W	V	C	L	T	R	W	E	S	S	Y	N	T	N	A	I	N	H	N	-	R	D	N	S	T	D	Y	G	I	F	Q	I	N	S	K	Y	62
Takifugu	-	K	V	F	Q	R	C	E	W	A	R	V	L	K	A	R	G	M	D	G	Y	R	G	I	S	L	A	D	W	V	C	L	S	K	W	E	S	Q	Y	N	T	N	A	I	N	H	N	-	T	D	G	S	T	D	Y	G	I	F	Q	I	N	S	R	W	62
Epinephelus	-	K	V	Y	E	R	C	E	W	A	R	L	L	K	A	N	G	M	D	G	F	R	G	N	S	L	A	D	W	V	C	L	S	Q	W	E	S	G	Y	S	T	T	A	T	N	H	N	-	R	D	G	S	T	D	Y	G	I	F	Q	I	N	S	R	W	62
Ctenopharyngodon	W	C	D	D	G	T	-	P	D	G	K	N	L	C	N	L	P	C	S	D	L	L	K	D	D	L	K	P	S	V	E	C	A	K	L	I	V	K	-	T	G	L	K	S	W	E	T	W	D	S	Y	C	N	G	R	K	M	K	R	W	T	K	G	123	
Danio	W	C	D	D	G	T	-	P	G	G	K	N	L	C	K	V	A	C	S	D	L	L	N	D	D	L	K	A	S	V	E	C	A	K	L	I	V	K	-	M	D	G	L	K	S	W	E	T	W	D	S	Y	C	N	G	R	K	M	S	R	W	V	K	G	123
Carassius	W	C	D	D	G	T	-	P	G	G	K	N	Q	C	K	I	P	C	A	D	L	L	K	D	D	L	K	A	S	V	E	C	A	K	L	I	V	K	-	T	E	G	L	K	S	W	D	T	W	S	S	Y	C	K	G	R	K	M	T	R	W	V	K	G	123
Cyprinus	W	C	D	D	G	T	-	P	G	G	K	N	K	C	K	I	P	C	S	D	L	L	K	D	D	L	K	A	S	V	E	C	A	K	L	I	V	K	-	T	E	G	L	K	S	W	D	T	W	G	S	Y	C	K	G	R	K	M	S	R	W	V	K	G	123
Horse	W	C	K	D	N	K	-	R	S	S	S	N	A	C	N	I	M	C	S	K	L	L	D	E	N	I	D	D	D	I	S	C	A	K	R	V	V	R	D	P	K	G	M	S	A	W	K	A	W	V	K	H	C	K	D	K	D	L	S	E	Y	L	A	S	126
Dog	W	C	K	S	N	S	-	H	S	S	A	N	A	C	N	I	M	C	S	K	F	L	D	D	N	I	D	D	D	I	A	C	A	K	R	V	V	K	D	P	N	G	M	S	A	W	V	A	W	V	K	H	C	K	G	K	D	L	S	K	Y	L	A	S	126
Chicken	W	C	N	D	G	R	T	P	G	S	R	N	L	C	N	I	P	C	S	A	L	L	S	S	D	I	T	A	S	V	N	C	A	K	K	I	V	S	D	G	N	G	M	N	A	W	V	A	W	R	N	R	C	K	G	T	D	V	Q	A	W	I	R	G	126
Japanese	W	C	N	D	G	R	T	P	G	S	R	N	L	C	N	I	P	C	S	A	L	L	S	S	D	I	T	A	S	V	N	C	A	K	K	I	V	S	D	V	H	G	M	N	A	W	V	A	W	R	N	R	C	K	G	T	D	V	N	A	W	I	R	G	126
Chinese	W	C	N	D	G	K	T	P	K	A	K	N	A	C	G	I	E	C	S	E	L	L	K	A	D	I	T	A	A	V	N	C	A	K	R	I	V	R	D	P	N	G	M	G	A	W	V	A	W	T	K	Y	C	K	G	K	D	V	S	Q	W	I	K	G	128
Terrapene	W	C	N	D	G	K	T	P	R	A	K	N	A	C	R	I	Q	C	G	A	L	L	T	A	D	I	T	A	S	V	N	C	A	K	R	V	V	R	D	P	N	G	M	G	A	W	V	A	W	T	K	N	C	K	G	R	D	V	S	P	W	I	R	G	127
Western	W	C	N	D	G	K	T	P	R	A	K	N	A	C	G	I	R	C	S	G	L	L	T	S	D	I	T	A	S	V	N	C	A	K	R	V	V	R	D	P	N	G	M	G	A	W	V	A	W	K	K	Y	C	K	G	K	D	V	S	K	W	I	S	D	127
Xenopus	W	C	N	D	D	K	T	P	R	S	H	N	A	C	N	I	N	C	R	D	L	L	S	D	D	I	T	Q	S	V	I	C	A	K	R	V	V	R	D	P	Q	G	M	E	A	W	V	G	W	R	N	H	C	K	G	R	D	L	S	Q	W	I	K	D	127
Andrias	W	C	E	D	G	K	T	P	R	S	K	N	A	C	Q	T	A	C	S	A	F	L	Q	D	D	I	T	A	A	V	A	C	A	K	R	V	V	Q	D	P	A	G	M	G	A	W	V	A	W	R	T	H	C	K	G	R	D	L	S	P	W	I	K	G</	

活性位点保守性分析

深海鱼类

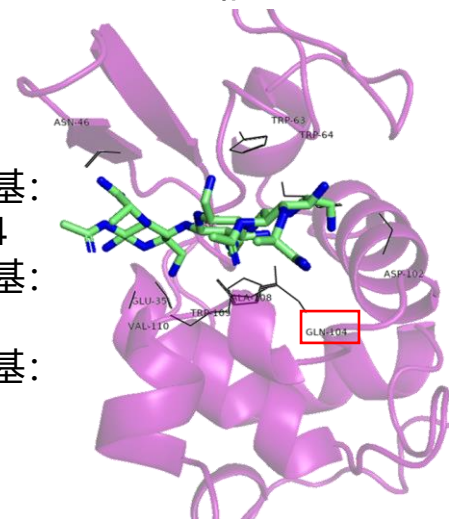


淡水鱼类



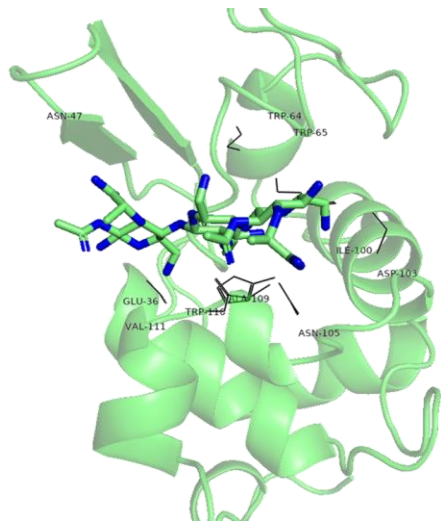
差异活性位点残基:
K61\D100\S104
多的活性位点残基:
R46
少的活性位点残基:
N46\N103

两栖纲

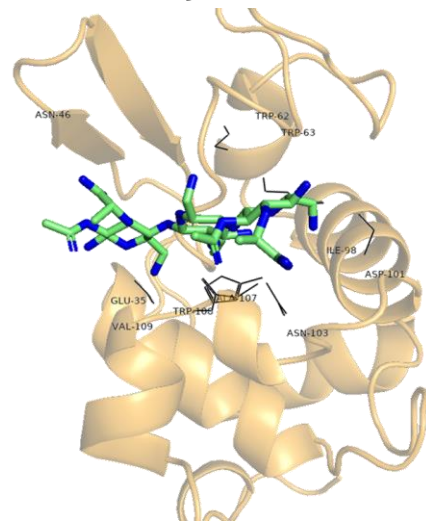


差异活性位点残基:
Q104
少的活性位点残基:
I96

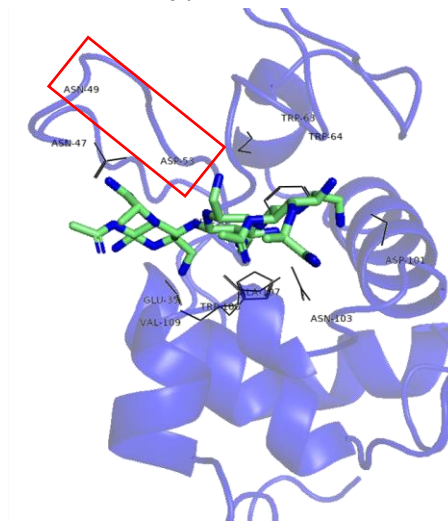
爬行纲



鸟纲



哺乳纲

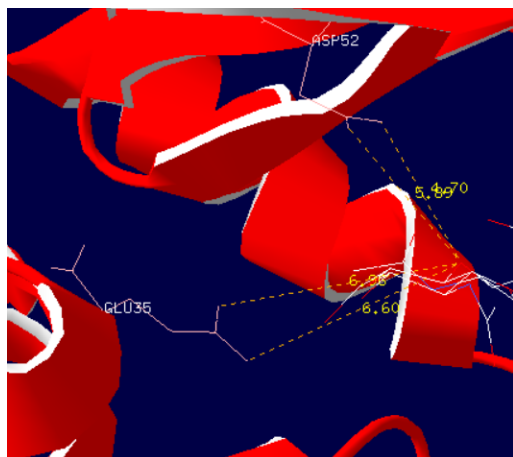


多的活性位点残基:
V109
少的活性位点残基:
I96

这些差异的活性位点可能是造成对细菌裂解种类和效率的潜在原因

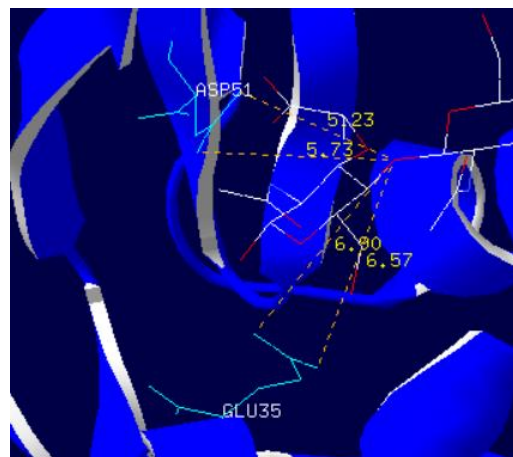
溶菌酶与底物的距离

Epinephelus coioides-LYZ



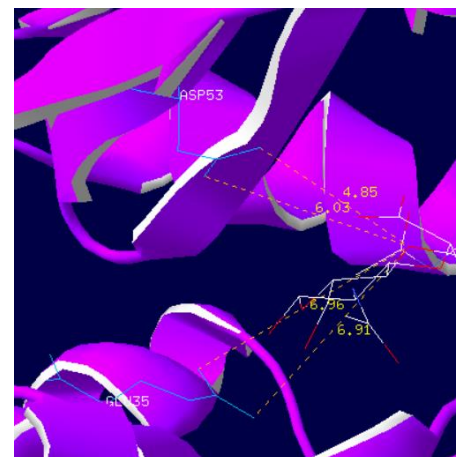
GLU-糖苷键:
6.6Å
ASP-糖苷键:
4.7Å

Danio rerio-LYZ



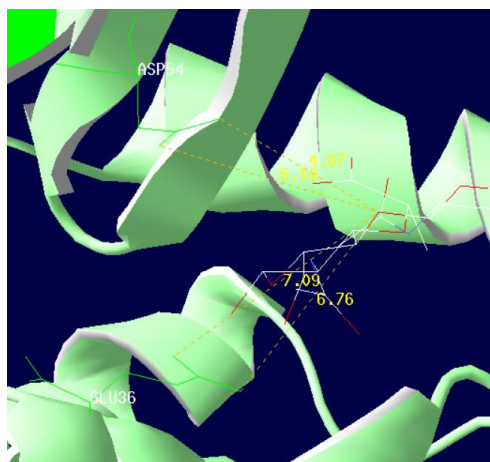
GLU-糖苷键:
6.57Å
ASP-糖苷键:
5.23Å

Xenopus laevis-LYZ



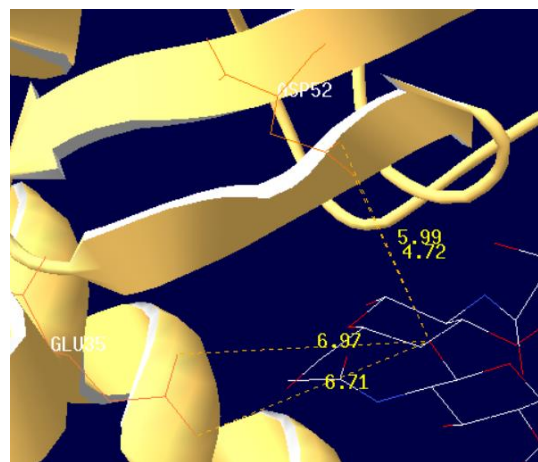
GLU-糖苷键:
6.91Å
ASP-糖苷键:
4.85Å

Chinese Softshell Turtle-LYZ



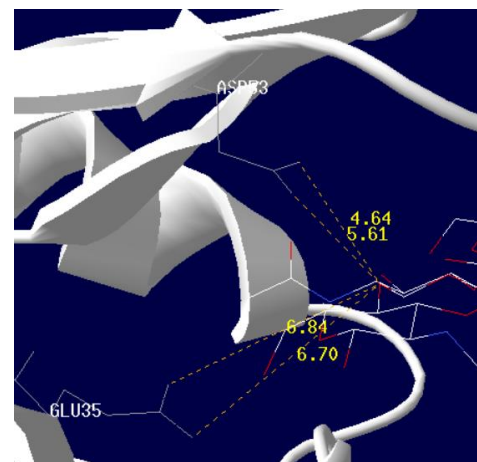
GLU-糖苷键:
6.76Å
ASP-糖苷键:
4.87Å

Chicken-LYZ



GLU-糖苷键:
6.71Å
ASP-糖苷键:
4.72Å

Dog-LYZ



GLU-糖苷键:
6.7Å
ASP-糖苷键:
4.64Å

Contents



背景



系统发育树分析



聚类分析



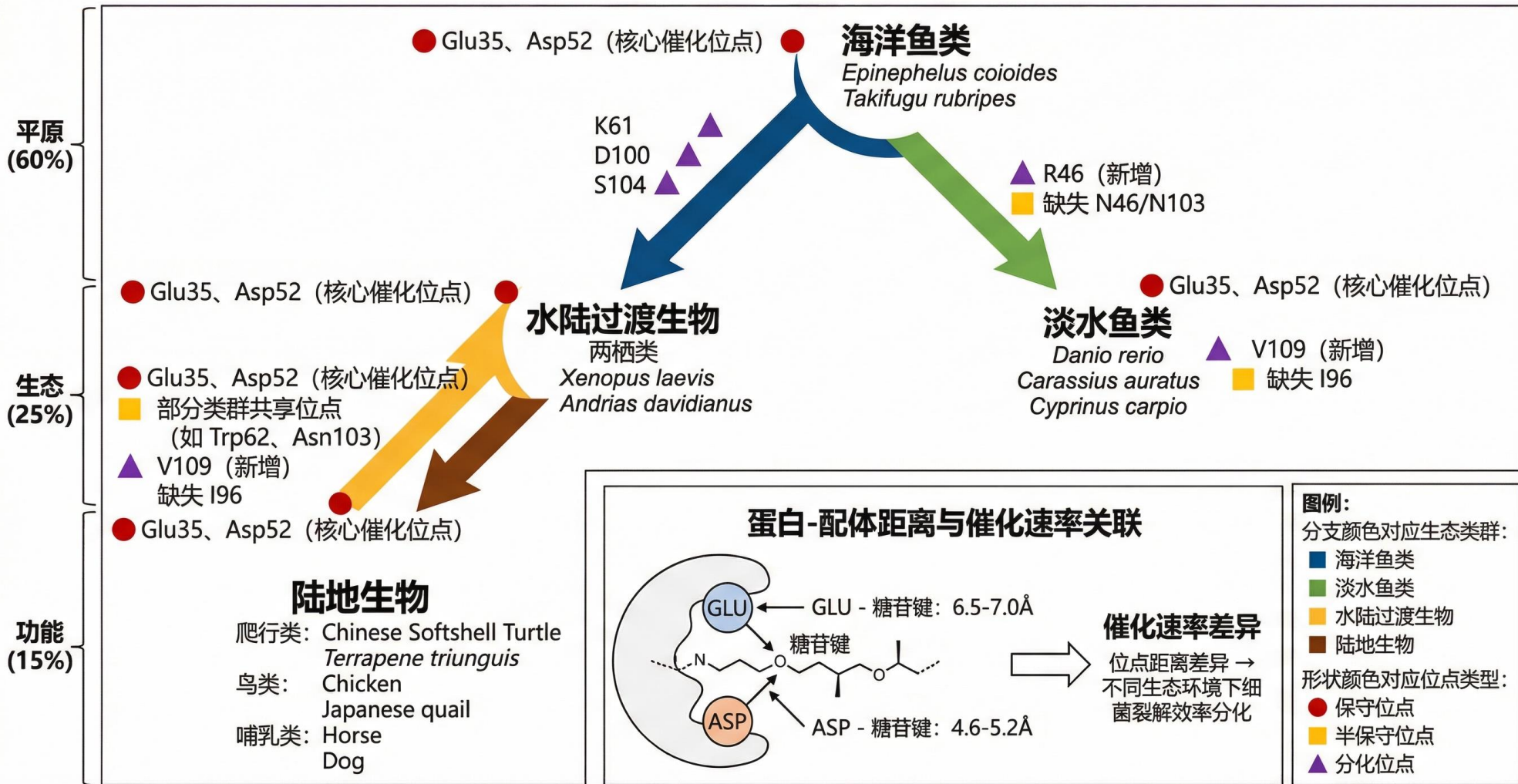
结构分析



总结

结论

溶菌酶 C 进化与功能特征整合示意图



核心结果:

- 从溶菌酶构建的发育关系来看存在并行分化
- 找到了不同生态下, 溶菌酶的一些保守、半保守和分化位点
- 测量预测蛋白模型与配体的距离, 预测不同生态环境下溶菌酶速率差异的潜在原因

局限性:

- 蛋白质结构的预测
- 基于同源比对的对接策略是否正确



中国农业科学院

CHINESE ACADEMY OF AGRICULTURAL SCIENCES

谢谢观看
请老师和各位同学批判指正