

# 分子对接技术在蛋白质基包装材料中的应用研究进展

doi:10.20269/j.cnki.1674-7100.2026.1001

陈景华<sup>1</sup> 王昌胜<sup>1</sup>

付婉莹<sup>2</sup> 罗 粲<sup>1</sup>

石梦涵<sup>1</sup>

1. 上海理工大学

出版印刷与艺术设计学院

上海 200093

2. 上海出版印刷高等专科学校

上海 200093

**摘要:** 传统的蛋白质基包装材料优化方法在应对可持续包装需求时存在效率低、成本高的局限性。为应对这一挑战,研究人员引入分子对接技术。其凭借高效模拟蛋白质与功能性分子相互作用的能力来改善材料性能,为实验设计提供科学的理论依据。此外,模拟与实验验证相结合的方式,在提升蛋白质基包装材料的抗菌性、阻隔性和力学性能方面展现出显著优势。因此,综述分子对接技术在蛋白质基包装材料中的应用框架,系统总结其在明胶、大豆蛋白、玉米醇溶蛋白、麦醇溶蛋白及酪蛋白/乳清蛋白中的模拟分析与实验验证研究成果。未来的研究重点是,开发更高精度的预测模型、实现多尺度模拟以及深化模拟与实验的融合,以进一步推动蛋白质基包装材料的智能化开发和工业化应用。

**关键词:** 分子对接技术; 蛋白质基包装材料; 可食用薄膜; 可持续包装

**中图分类号:** TB484; TS206.4

**文献标志码:** A

**文章编号:** 1674-7100(2026)01-0001-12

**引文格式:** 陈景华, 王昌胜, 付婉莹, 等. 分子对接技术在蛋白质基包装材料中的应用研究进展 [J]. 包装学报, 2026, 18(1): 1-12.

自 20 世纪 50 年代起,塑料凭借成本低廉、质量轻、耐用性强及功能多样等优点,广泛应用于工业、农业和包装等领域<sup>[1]</sup>。然而,石油基塑料在自然环境中难以被微生物分解,导致土壤污染、海洋垃圾堆积等问题日益突出。废弃塑料不仅会破坏动植物栖息地、威胁生物多样性,微塑料还会通过食物链进入生态系统,对环境与人体健康带来潜在风险<sup>[2-3]</sup>。为应对这一挑战,研究人员正尝试寻找具有天然降解性的生物基聚合物,以期作为塑料的替代品<sup>[4]</sup>。蛋白质基材料因其来源丰富、力学性能优异且改性潜力多样,被认为是替代石油基塑料的理想候选。这些材料的开发不仅有助于减少环境污染,还能推动可持续发展的实现<sup>[5]</sup>。

目前,蛋白质基材料主要分为植物蛋白和动物

蛋白两大类。植物蛋白通常从谷物或油籽中提取,如大豆蛋白分离物 (soybean protein isolate, SPI)、玉米醇溶蛋白和谷蛋白等;动物蛋白则来源于乳制品、肉类和鸡蛋,包括乳清蛋白、酪蛋白、胶原蛋白和明胶等<sup>[6]</sup>。这些生物聚合物分子量高、结构多样且易于改性,在包装材料领域具有广阔应用前景。其既可整合天然抗菌成分提升食品保鲜性能,又展现出优异的力学强度和气体阻隔性<sup>[7]</sup>。随着研究的深入,各种化学修饰策略被用于赋予蛋白质额外功能,以满足不同应用需求<sup>[8]</sup>。然而,当前的开发流程仍主要依赖大规模实验筛选与优化,其周期长、成本高,且缺乏微观层面上的机制指导,容易造成原材料浪费和环境负担。基于此,分子对接技术得以应用。其能够精确模拟蛋白质与配体间的相互作用,为实验

收稿日期: 2025-10-21

基金项目: 上海出版印刷高等专科学校高等教育研究所课题 (GJS2025-01)

作者简介: 陈景华, 女, 副教授, 主要从事功能性包装材料研究, E-mail: cjhshl@163.com

设计阶段提供科学指导,进而提高材料开发的效率并降低资源消耗。因此,本研究拟梳理分子对接技术在蛋白质基包装材料中的应用进展,以便于相关领域的研究者较好地理解分子对接技术在蛋白质基包装材料中的应用潜力和挑战。

## 1 分子对接技术

### 1.1 分子对接技术的理论基础

分子对接技术是一种用于模拟和预测蛋白质与小分子配体相互作用的计算方法。其核心在于将配体置于受体结合位点,通过算法评估空间互补性与结合能,以确定最稳定的结合构象。该思想源自1894年Fisher提出的“锁钥模型”,强调受体与配体间的空间匹配重要性<sup>[9]</sup>。1982年,Irwin Kuntz教授提出“分子对接”概念并开发了首个软件DOCK,奠定了现代分子对接技术的基础<sup>[10]</sup>。分子对接计算的核心是构象搜索策略和打分函数<sup>[11]</sup>,主要解决两大问题:空间匹配,保证配体能准确嵌入结合位点,如图1所示;能量匹配,通过打分函数量化结合能,评估结合稳定性,为后续的配体优化与设计提供理论依据。

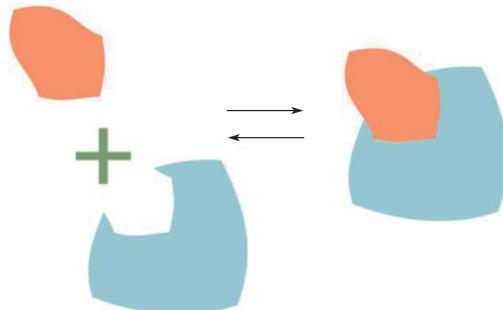


图1 分子对接“锁钥模型”

Fig. 1 Molecular docking “lock-and-key” model

### 1.2 分子对接技术的分类

分子对接技术根据受体与配体构象的灵活性,可分为刚性对接、半柔性对接和柔性对接<sup>[12-14]</sup>。1)刚性对接技术假定受体和配体的构象保持固定,仅通过调整两者间的相对位置来探寻结合模式。这种方式的计算效率高,适用于蛋白质-蛋白质或蛋白质-核酸等大分子体系的分析。然后,由于忽略了构象变化,其预测精度较低,常导致假阳性结果。典型程序有ZDOCK<sup>[15]</sup>。2)半柔性对接技术通过固定受体构象的同时,允许配体在限定范围内调整构象,实现了计算效率与预测准确性之间的平衡。该技术广泛应用于蛋白质与小分子的结合研究。目前,常用软件包括

AutoDock Vina<sup>[16]</sup>和Glide<sup>[17]</sup>。3)柔性对接技术允许受体与配体均发生构象调整,从而更真实地模拟分子间的相互作用。该技术的预测精度高,但计算资源需求较大,适合复杂分子体系的高精度分析。代表性软件有GOLD<sup>[18]</sup>、RosettaLigand<sup>[19]</sup>和HADDOCK<sup>[20]</sup>。

### 1.3 构象搜索策略

构象搜索是分子对接技术的关键,旨在高效生成并筛选配体在受体结合位点内的合理构象<sup>[12, 21]</sup>。其主要方法包括几何形状匹配、片段增量组装和蒙特卡洛采样,如图2所示。

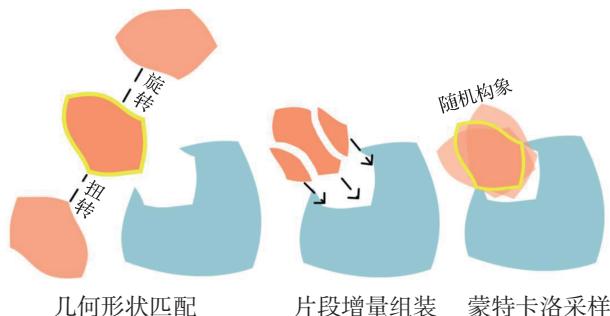


图2 构象搜索策略

Fig. 2 Conformational search strategies

1)几何形状匹配通过优化配体与受体活性位点的三维空间契合,生成初始结合模式。该技术因计算效率高而广泛应用于虚拟筛选。典型程序如Glide和AutoDock Vina。2)片段增量组装通过断裂配体的可旋转键,在受体结合位点内逐片段重构分子,利用分子间相互作用优化构象。该技术适合于高精度对接复杂配体。常用程序有GOLD、MOE-Dock<sup>[22]</sup>和AutoDock<sup>[23]</sup>。3)蒙特卡洛采样采用随机化方法生成多样化构象,并通过能量函数评估筛选满足阈值的构象。该技术能够有效探索广阔的构象空间。代表性程序如RosettaLigand。

### 1.4 计算工具与数据库

在蛋白质-小分子对接研究中,多种软件工具因算法、打分函数及应用场景的差异而各具优势。打分函数是评估蛋白质-配体结合亲和力的核心组件,通常分为基于力场、基于经验和基于知识3类<sup>[24-25]</sup>。基于力场的打分函数采用经典力学原理计算键合及非键合相互作用的能量贡献(如CHARMM力场),但常忽略溶剂效应;基于经验的打分函数通过加权能量项估算结合能,具有较高的计算效率,适合快速筛选;基于知识的打分函数能从已知复合物数据中提取统计规律,其计算简便,因而适用于大

规模化化合物数据库的分析工作。这些打分函数直接影响软件性能, 需要与具体算法匹配。AutoDock 采用遗传算法, 支持柔性残基处理, 适合资源受限场景。AutoDock Vina 通过蒙特卡洛采样提升速度, 适用于大规模筛选。DOCK 利用形状匹配快速生成结合模式, 适合初始构象探测。FlexX<sup>[26]</sup>以碎片组装方法精确对接复杂配体, 适用于高精度需求。Glide 在诱导契合中表现优异但资源需求高, 适合动态变化研究。HADDOCK 专为数据驱动的生物大分子对接设计, 整合实验数据优化结果。RosettaLigand 借助深度学习提升结合能预测精度。此外, Discovery Studio 利用其 CDOCKER 模块, 基于 CHARMM 力场进行柔性对接, 支持从结构优化到结果可视化的完整流程, 适合需要集成分析的场景。研究者可根据目标选择工具: 筛选用 AutoDock Vina 或 DOCK, 高精度选 FlexX 或 Glide, 大分子对接推荐 HADDOCK, 优化则用 RosettaLigand, 而复杂体系分析可考虑 Discovery Studio, 如表 1 所示。

表 1 常用分子对接软件  
Table 1 Commonly used molecular docking software

软件	蛋白质柔性	算法	评分函数
AutoDock <sup>[23]</sup>	是(选择性侧链柔性)	Lamarckian 遗传算法	经验自由能评分函数
AutoDock Vina <sup>[16]</sup>	是(选择性侧链柔性)	蒙特卡洛与 BFGS 局部优化	基于知识的评分函数
Glide <sup>[17]</sup>	是(诱导契合对接)	系统搜索, 蒙特卡洛采样	GlideScore (SP 和 XP, 基于力场、经验、知识)
GOLD <sup>[18]</sup>	是(部分柔性, 侧链)	遗传算法	GoldScore、ChemScore、ASP 评分
FlexX <sup>[26]</sup>	是(通过 FlexX-Ensemble 支持多构象)	增量构建, 树搜索	FlexX 评分、ChemScore
Surflex <sup>[27]</sup>	是(完全柔性)	基于分子相似性的表面搜索	Surflex-Dock 评分函数(极性、疏水、熵项)
DOCK <sup>[28]</sup>	是(后期版本支持柔性锚点或软核势)	锚点生长, 基于形状的算法	基于网格的能量评分、表面互补性等
MOE-Dock <sup>[22]</sup>	是(诱导契合)	Alpha 球方法, 三角匹配	London dG、GBVI/WSA dG 等
rDock <sup>[29]</sup>	是(侧链柔性)	基于网格的对接, 遗传算法	经验势能
ICM <sup>[30]</sup>	是(完全柔性)	全局优化, 蒙特卡洛与能量最小化	ICM 评分函数(经验)
HADDOCK <sup>[20]</sup>	是(蛋白质-蛋白质对接完全柔性)	数据驱动对接, 结合刚性与半柔性精修	HADDOCK 评分(模糊交互约束+能量项)
RosettaLigand <sup>[19]</sup>	是(诱导契合)	低分辨率对接, 高分辨率精修	Rosetta 能量函数

表 2 蛋白质-配体预测技术迁移分析  
Table 2 Protein-ligand prediction technique migration analysis

数据库	网 址	说 明
RCSB	<a href="https://www.rcsb.org/">https://www.rcsb.org/</a>	提供实验确定的蛋白质结构, 如胶原蛋白和酪蛋白, 用于受体建模
AlphaFold	<a href="https://alphafold.ebi.ac.uk/">https://alphafold.ebi.ac.uk/</a>	提供预测的蛋白质三维结构, 弥补实验数据不足, 适用于无序蛋白研究
ZINC20	<a href="http://zinc20.docking.org/">http://zinc20.docking.org/</a>	收录超过 140 亿化合物, 支持筛选增塑剂或抗菌剂等小分子
ChEMBL	<a href="https://www.ebi.ac.uk/chembl/">https://www.ebi.ac.uk/chembl/</a>	包含 200 多万条化合物生物活性数据, 辅助识别包装材料添加剂
BindingDB	<a href="https://www.bindingdb.org/">https://www.bindingdb.org/</a>	汇集蛋白-小分子结合亲和力数据, 用于验证对接结果
PDBbind	<a href="http://www.pdbbind.org.cn/">http://www.pdbbind.org.cn/</a>	提供 PDB 结构与结合常数数据, 用于对接算法性能测试

在蛋白质基包装材料的研究中, 多个关键数据库为分子对接提供了重要支持。PDB 提供胶原蛋白等实验结构, 是受体建模的核心资源。AlphaFold 通过 AI 预测结构, 弥补实验数据的不足。ZINC20 收录超 140 亿个化合物, 用于筛选增塑剂等小分子。BindingDB 提供结合亲和力数据, 验证对接结果。PDBbind 结合 PDB 结构与亲和力数据, 优化对接算法, 如表 2 所示。

### 1.5 分子对接技术的操作流程及实验验证

分子对接操作流程主要包括软件选择、受体与配体准备、对接策略设置、构象搜索、结合模式评估及结果优化, 如图 3 所示。根据研究目标, 选择合适软件至关重要, 其中 AutoDock Vina 适用于大规模虚拟筛选, Glide 擅长复杂诱导契合, GOLD 则提供高精度柔性对接。在受体与配体准备阶段, 受体蛋白质的三维结构可从 PDB 数据库获取现有模型, 若模型存在结构缺失, 则用 AlphaFold 预测补全, 同时需去除水分子与配体、修复残基并添加氢原子, 以确保结构

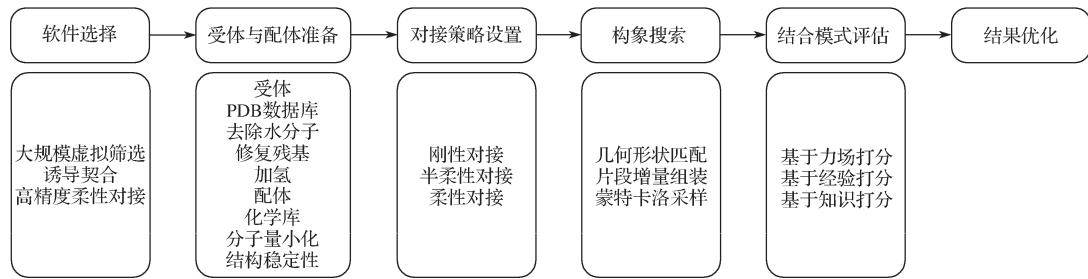


图 3 分子对接技术流程示意图

Fig. 3 Schematic diagram of molecular docking technical workflow

的完整性；配体则需从化学库筛选或实验合成获取小分子化合物，并通过能量最小化优化稳定性。对接策略需结合研究需求进行调整：刚性对接适用于小分子-蛋白等结构稳定体系；蛋白-蛋白等大分子间的相互作用则更适合采用半柔性或柔性对接策略，具体而言，半柔性对接适用于小分子与蛋白结合且蛋白局部构象可能微调的场景，柔性对接则用于处理构象变化复杂的体系。构象搜索拥有多样方法，其中几何形状匹配应用于筛选过程，片段增量组装应用于处理复杂配体问题，蒙特卡洛采样则能探索广阔构象空间。构象搜索完成后，会生成多组潜在结合模式，随后通过打分函数进行评估，以筛选最优结合模式。

结合实验数据可进一步优化对接结果。用分子动力学模拟技术评估溶液动态稳定性，并用 PyMOL 软件对氢键 / 疏水位点进行可视化处理，以筛选出可靠模式；随后，通过 FTIR、XRD、SEM、UV-Vis、荧光淬灭、HPLC、DSC 及薄膜测试确认结构 / 功能变化，以确保材料适用性。该过程强化预测可靠性，为食品薄膜设计奠定实验基础。

Wei M. P. 等<sup>[31]</sup>通过Discovery Studio 2019开展分子对接模拟,发现原花青素可以与明胶(gelatin)、 $\kappa$ -角叉菜胶经氢键交联而形成致密凝胶结构,结合能分别为-7.5 kcal/mol(明胶-原花青素)、-5.2 kcal/mol( $\kappa$ -角叉菜胶-原花青素),且原花青素对明胶亲和力更强。随后,研究者通过实验验证了上述结论。以明胶、 $\kappa$ -角叉菜胶为基材,按质量比1:2、1:1、2:1进行混合,并添加2%原花青素(交联剂)及20%甘油(增塑剂),于80℃下搅拌溶解30 min,随后在25℃下搅拌1 h后铸膜,于25℃、75%相对湿度下干燥,制得复合膜。FTIR结果显示复合膜酰胺A带、酰胺B带及3300 cm<sup>-1</sup>处峰移位;XRD结果表明原花青素分散均匀,组分相容(仅G/C1:1/P膜峰形更平缓);从SEM结果观察

到, G/C1:1/P 膜表面无孔洞和气泡且形态致密。以上结果共同支持对接预测的交联机制。此外, Kang S. F. 等<sup>[32]</sup>采用 AutoDockTools-1.5.7 模拟大豆蛋白 7S (β- 伴大豆球蛋白, PDB:1UIK)、11S (大豆球蛋白, PDB:1OD5) 与甘油 (结构来自 DrugBank 数据库) 的分子对接, 以评估氢键和范德华力的作用。结果显示, 结合能介于 -5.8~ -4.2 kcal/mol, 且形成 3~5 个氢键。为验证该分子作用对材料的影响, 研究者将 SPI 分别与质量分数为 6% 和 2.5% 的甘油进行混合均质, 经不同温度 (70, 80, 90 °C) 加热 30 min 后制成膜液, 再流延干燥并平衡得 SPI- 甘油复合膜。通过 TGA 评估复合膜的热稳定性, 结果显示 80 °C 处理组的失重率最低, 热稳定性最优。从 FTIR 光谱中的酰胺 I 带结果可知, 甘油使 α- 螺旋略降, 热处理促进结构有序化。荧光光谱中 Trp 峰红移, 证实了疏水基团暴露。进一步的薄膜性能测试结果 (透光率降低、拉伸强度提升、水蒸气 / 氧气阻隔性优化) 证实了热变性与增塑机制的有效性, 支持了甘油干扰蛋白网络、热变性改善膜结构的结论。

综上所述，分子对接技术作为蛋白质基包装材料优化的核心方法，通过精确模拟蛋白质与功能分子的相互作用（如氢键和疏水作用），揭示材料微观机制，并为实验设计提供理论指导，从而降低研发成本并提升热稳定性、阻隔性和机械强度。该技术与 FTIR、XRD 和 SEM 等验证方法相结合，已在明胶、 $\kappa$ -角叉菜胶和大豆蛋白等体系中成功应用，推动了可持续包装创新。

## 2 分子对接技术在蛋白质基包装材料中的应用

随着分子对接技术与数据库资源的不断发展，其在蛋白质基包装材料研发中的应用日益深化，且与智能功能组分的融合成为可持续包装的重要发展

方向<sup>[33]</sup>。图 4 展示了分子对接技术在蛋白质基包装材料研发中的系统性应用流程。

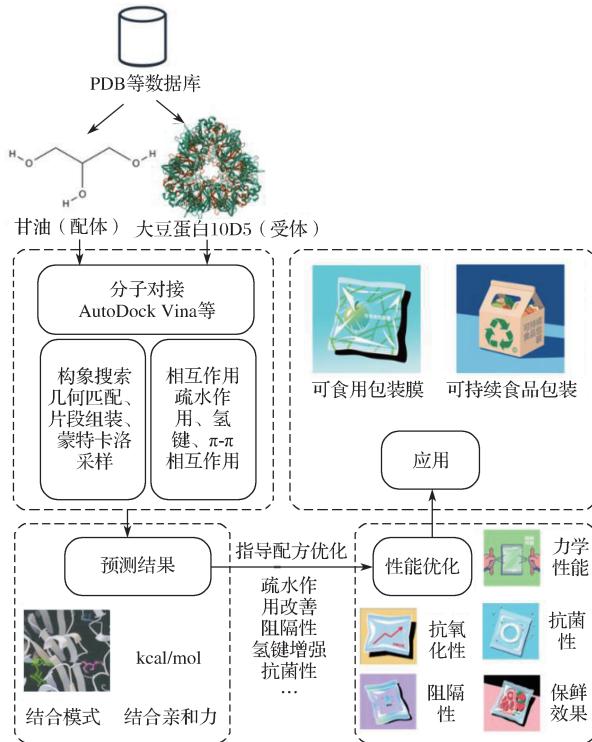


图 4 分子对接技术在蛋白质基包装材料中的应用示意图

Fig. 4 Schematic diagram of molecular docking applications in protein-based packaging materials

从 PDB 等数据库获取实验或预测的蛋白质结构 (如明胶)，通过 AutoDock Vina 等软件执行分子对接，结合结合能 (以 kcal/mol 为单位) 和评分函数评估配体-受体相互作用，优化蛋白质基材料的性能，最终生成

可用于食品包装的可食用薄膜或可持续包装产品 (如包装袋和盒子)。本研究聚焦分子对接技术在明胶等蛋白质基材料中的具体应用，深入分析其与功能性小分子 (如增塑剂或抗菌剂) 的结合机制，并探讨其在提升机械强度、阻隔性能和生物相容性方面的潜力。

## 2.1 明胶

明胶是从动物皮肤、骨骼和结缔组织中提取的胶原蛋白部分水解产物。根据处理方式，可分为 A 型 (酸法) 和 B 型 (碱法)。明胶因其独特的螺旋结构，展现出优异的成膜性、凝胶性和生物相容性。在包装材料中，明胶常作为基质，用于制备食品包装薄膜。此薄膜能有效阻隔氧气和水分，从而保护食品免受外界影响，延长食品保质期。表 3 详细展示了分子对接技术在明胶基包装材料中的模型与技术应用。

分子对接技术在明胶基包装材料研究中得到广泛应用，用于揭示明胶与功能性小分子的相互作用机制，优化膜性能。S. Bhatia 等<sup>[34]</sup> 利用 MOE 2022 模拟明胶 -SA-CMC 复合膜与 AmB 的结合，揭示了甘油通过氢键稳定 AmB (结合能为  $-6.86 \text{ kcal/mol}$ )，并通过优化甘油浓度来提升膜柔韧性 (断裂伸长率达 35.45%) 和抗菌性 (抑制 *Candida albicans* 直径为 24.49 mm)。H. Nabeel Ahmad 等<sup>[35]</sup> 借助 AutoDock Vina 工具，创建鞣花酸与明胶 / 羧甲基纤维素 (明胶源自 PDB ID: 5K31，鞣花酸及羧甲基纤维素源自 PubChem) 的三维框架，运用标准参数考察交互动态，并以结合亲和力量化稳定性。结果证实，鞣花酸通过氢键及范德瓦尔斯力与明胶 / 羧甲基纤维素

表 3 分子对接技术在明胶基包装材料中的模型与技术应用

Table 3 Models and technical applications of molecular docking technology in gelatin-based packaging materials

包装材料	分子对接工具	算法 / 模型类型	参数优化设置	技术性能指标
明胶 -SA-CMC 与 AmB	MOE	蒙特卡洛采样 (半柔性对接)	氢键约束, 甘油浓度范围	结合能精度, 构象稳定性
明胶 / $\kappa$ -角叉菜胶与原花青素	Discovery Studio 2019	诱导契合 + 遗传算法 (柔性对接)	氢键优化, 1:1 配比 网格搜索	交联能量, 构象采样效率
明胶 /CMC 与鞣花酸	AutoDock Vina	BFGS 局部优化 (半柔性对接)	范德瓦尔斯力权重, PPE 浓度	结合亲和力预测精度, 能量评分
GAO-5F/AR 与 D-半乳糖	AutoDock 4.2.6	Lamarckian 遗传算法 (刚性 - 柔性混合对接)	新增氢键约束 (Y297、Y354)	催化活性计算精度, 能量最小化
包装材料	计算结果	数据结果	参考文献	
明胶 -SA-CMC 与 AmB	结合能 $-6.86 \text{ kcal/mol}$	EAB 35.45%, 抗菌圈 24.49 mm	[30]	
明胶 / $\kappa$ -角叉菜胶与原花青素	氢键驱动交联优化	接触角增加, DPPH 清除率提升	[31]	
明胶 /CMC 与鞣花酸	结合亲和力 $-7.5 \text{ kcal/mol}$	拉伸强度 186 MPa, DPPH 84.15%	[32]	
GAO-5F/AR 与 D-半乳糖	催化活性 $451.14 \text{ U/mg}$	接触角 102°, 水蒸气透过率 $0.035 \text{ g} \cdot \text{mm}/(\text{m}^2 \cdot \text{h} \cdot \text{kPa})$	[34]	

锚定 ( $-7.5 \text{ kcal/mol}$ )，并在复合体中提升稳固性，这揭示了交联强化路径；参考含鞣花酸等多种成分的石榴皮提取物 (PPE) 浓度变异的交互模式，调控其添加水平，最终得到 PPE 浓度为 2% 时强化膜强度 ( $(186.125 \pm 12.807) \text{ MPa}$ )、抗氧化能力 (DPPH 自由基清除率达  $(84.15 \pm 0.12)\%$ ) 最佳，可将牛肉货架期延长至 3 d。Sun H. H. 等<sup>[36]</sup>运用 AutoDock 4.2.6 软件对 GAO-5F/AR 突变体与 D- 半乳糖的三维模型进行分子对接，设定活性位点及网格尺寸等条件以评估交互，并以氢键数目检验催化效能。模拟结果显示，突变体的引入导致新氢键 (Y297、Y354) 的形成，从而将活性推升至 451.14 U/mg。这一结果有助于阐释酶 - 底物的锚定原理。依托交互细节，锁定关键氨基酸位点，并通过定点突变工程化酶变体，进而优化了膜的疏水性能 (接触角为  $(101.98 \pm 1.76)^\circ$ ) 以及阻水屏障 (水蒸气透过率为  $(0.085 \pm 0.002) \text{ g} \cdot \text{mm}/(\text{m}^2 \cdot \text{h} \cdot \text{kPa})$ )。

由此可见，分子对接技术通过解析明胶与抗菌剂、抗氧化剂的相互作用机制，显著提升了包装膜的抗菌、抗氧化和力学性能，为可持续食品包装提供了理论支持。然而，现有研究较少量化对接参数 (如结合能) 与宏观性能 (如阻隔性) 的关联，未来需结

合分子动力学模拟和实验验证，深入探索明胶基膜在复杂食品体系中的长期稳定性与实际应用效果。

## 2.2 麦醇溶蛋白

麦醇溶蛋白 (gliadin) 是小麦中的主要贮藏蛋白，属醇溶蛋白类，富含谷氨酰胺和脯氨酸。麦醇溶蛋白分子结构中的疏水性氨基酸残基使其能在水中自组装形成纳米结构，具有良好的成膜性和延展性。因此，麦醇溶蛋白常用于制备可食用薄膜。分子对接技术与动力学模拟技术为麦醇溶蛋白基包装膜的性能优化提供了分子机制支持。Yu J. T. 等<sup>[37]</sup>利用 Gromacs 2019.1 和 Amber03 力场模拟  $\alpha$ - 麦醇溶蛋白在乙醇水溶液中的构象行为。结果显示，均方根偏差 (RMSD) 维持在约 0.25 nm (见图 5a)，这表明骨架稳定性良好，而均方根波动 (RMSF) 分析显示 Ala174-Ser184 区域的灵活性较高 (见图 5b)，这说明乙醇通过氢键和范德瓦尔斯力驱动蛋白质结构稳定，维持二硫键和盐桥网络。此外，乙醇浓度升高导致 Loop 比例增加而 Helix 比例减少 (见图 5c)，这与 gliadin-water 氢键从 647.80 减至 414.26 的结果一致 (见图 5d)。这为优化麦醇溶蛋白基可食用薄膜的力学强度和溶液环境适应性提供了分子机制支持，展现其在食品包装领域的应用潜力。He W. J. 等<sup>[38]</sup>用 Discovery

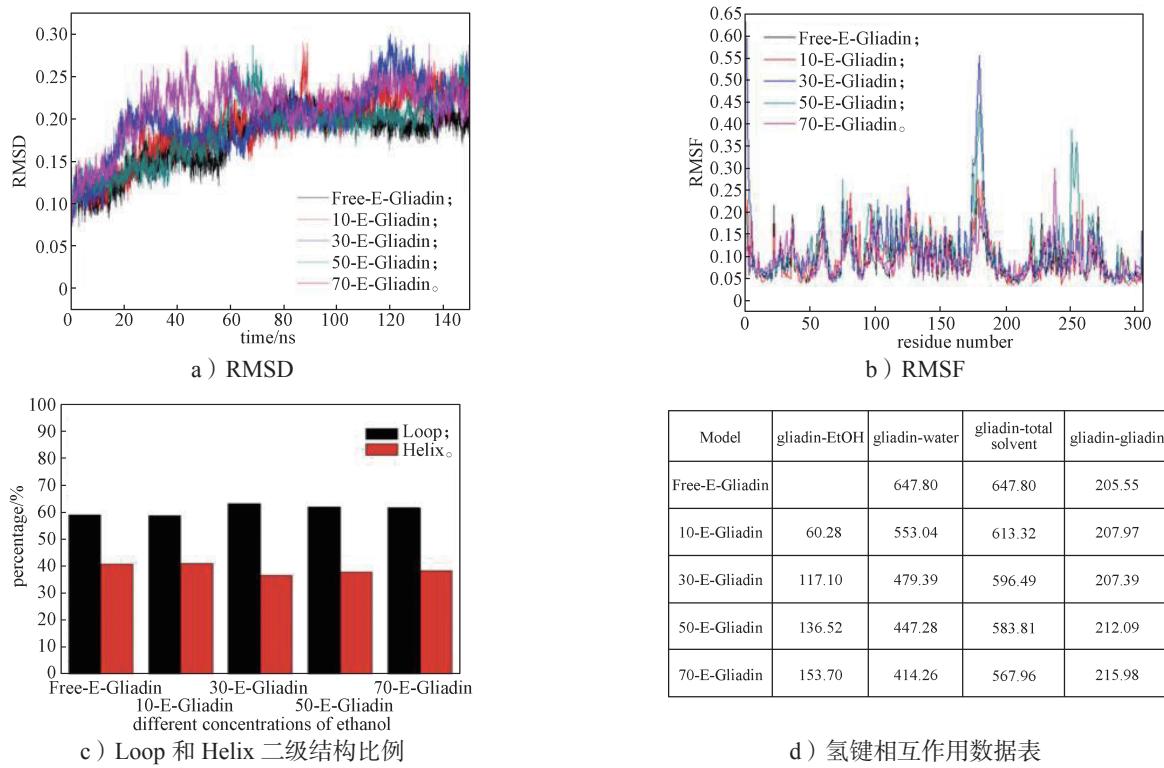


图 5 不同乙醇浓度下  $\alpha$ - 麦醇溶蛋白的分子动力学和结构分析

Fig. 5 Molecular dynamics and structural analysis of  $\alpha$ -gliadin in ethanol solutions

Studio 软件构建茶多酚(表没食子儿茶素没食子酸酯(EGCG), 源自 PubChem)与谷蛋白(含麦醇溶蛋白, 源自 I-TASSER 等数据库)的三维构象, 应用结合半径 10 Å、pH=11 等约束分析交互, 并用亲和力指标衡量稳定性。结果显示, EGCG 通过氢键和疏水交互与谷蛋白结合, 麦醇溶蛋白、低分子量麦谷蛋白、高分子量麦谷蛋白的对接能量分别为 -65.79, -74.65, -58.54 kcal/mol, 并在复合体系中强化网络, 这一结果可以解析致密化网络构建原理; 基于交互热点, 精调膜架构, 通过比例调控及交联策略, 提升拉伸强度与水蒸气阻隔。Guo Z. Q. 等<sup>[39]</sup>借助 AutoDock 平台构建从 PDB 提取的麦醇溶蛋白晶体、从 PubChem 获取的葡萄皮提取物花青素单体(如 Pt3G、M3G)的三维构象, 采用分子形状及可旋转键参数探究交互, 并以结合能检验稳定性。分析结果表明, Pt3G 和 M3G 通过氢键、疏水作用与麦醇溶蛋白联结(对接能量分别为 -7.26, -6.69 kJ/mol), 并在复合体中巩固形态, 这一结果可揭示紧凑结构生成原理; 结合蛋白构象移变(α-螺旋升至 12.9%), 完善薄膜制备, 通过提取物投加及干燥调控, 强化花青素耐热性与抗氧化水平, 这为麦醇溶蛋白薄膜在面制品包装的应用奠定了分子基础。

综上所述, 利用分子对接技术揭示麦醇溶蛋白与小分子及溶剂的相互作用机制, 显著改善了膜的力学性能、抗菌性和稳定性, 为可食用包装提供了分子层面的支持。未来需验证其在复杂食品体系中的实际效果, 探索溶剂环境(如湿度、pH 等)对膜性能的长

期影响, 并开发标准化对接参数以指导工业化生产。

### 2.3 大豆蛋白

大豆蛋白(soy protein)是从大豆提取的植物蛋白, 主要包括 7S 和 11S 球蛋白。其结构赋予其优异的乳化性、凝胶性和成膜性。大豆蛋白因其高营养价值和环保特性, 可替代传统塑料, 在包装材料中常用于制备生物降解薄膜。

分子对接技术为大豆蛋白基包装膜的功能优化提供了分子机制支持。相关研究主要聚焦非共价相互作用及复合体系的性能提升。T. Shevtsova 等<sup>[40]</sup>通过分子对接技术研究了大豆蛋白与纤维素、半纤维素及木质素的非共价相互作用, 并指导添加微纤化纤维素(MFC)和橄榄石粉(OSP)优化复合膜性能。相关对接结果如图 6 所示。图 6a 呈现 3AUP 大豆蛋白与半纤维素复合物结构及其结合位点(-7.7 kcal/mol), 强调极性残基作用; 图 6b 显示 1OD5 大豆蛋白与纤维素复合物结构及其结合位点(-7.3 kcal/mol)适应亲水性配体; 图 6c 呈现 3AUP 大豆蛋白与纤维素复合物结构及其结合位点(-6.2 kcal/mol)。P. Rani 等<sup>[41]</sup>通过 Discovery Studio 对大豆分离蛋白与槲皮素的三维模型, 运用原子电荷及力场参数考察交互过程, 并用结合能评估稳定性。模拟结果显示, 槲皮素经氢键、疏水作用及盐桥与蛋白锚定(-198.581 kcal/mol), 并在复合体系中稳固框架, 这可解析复合生成原理; 参考蛋白表面疏水度变异, 调整成膜工艺, 提升了拉伸强度(6.17 MPa)及抗菌潜力(针对大肠杆菌及李斯特菌), 此为

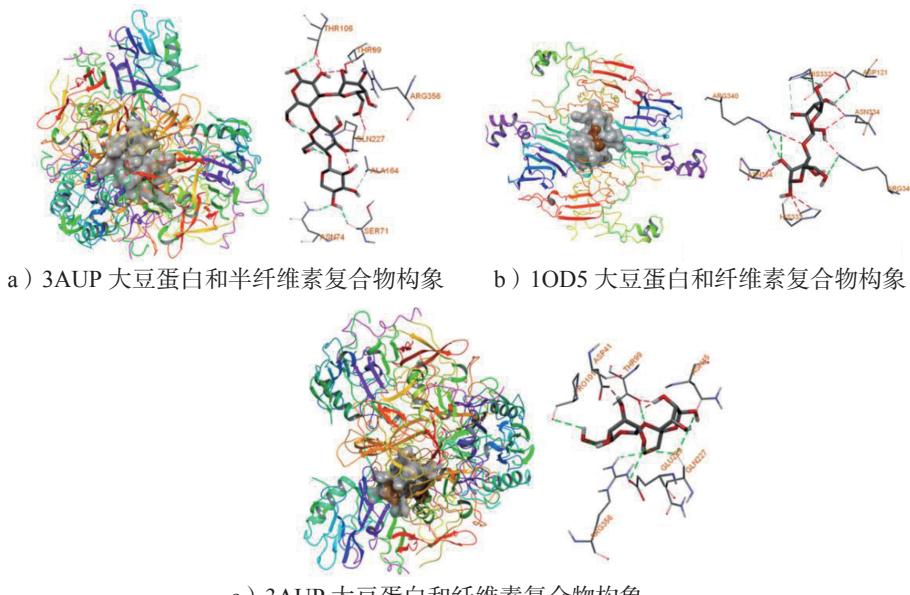


图 6 分子对接技术模拟大豆蛋白与配体的复合物结构及相互作用

Fig. 6 Molecular docking technology simulating the complex structures and interactions between soybean protein and ligands

大豆蛋白食用包装膜的效能优化提供分子支撑。Yong Y. Y. 等<sup>[42]</sup>利用 AutoDock 4 对大豆分离蛋白 (7S/11S) 与姜黄素的三维构象应用标准参数分析交互，并以氢键及疏水交互检验稳定性。结果表明，姜黄素通过多重氢键及疏水联结与蛋白结合，在复合体中强化锚定。这可阐释紧密交互原理；依托交互区域，完善双层膜设计，通过大豆分离蛋白与壳聚糖比例优化，提升膜的机械强度、抗菌效能(对金黄色葡萄球菌及大肠杆菌)及抗氧化能力 (DPPH 清除率 53.2%)。改性壳聚糖作为天然高效的抗菌基材，其通过分子修饰策略增强抗菌活性与复合相容性的核心机制，为大豆蛋白 - 壳聚糖复合膜的配方精准优化提供了重要理论参考<sup>[43]</sup>。

利用分子对接技术解析大豆蛋白与多酚、增塑剂的非共价作用，可显著提升膜的力学性能、抗菌性和阻隔性，为可持续包装材料设计提供理论基础。未来需建立结合能与膜性能的定量模型，并通过实验验证膜在实际食品体系中的长期稳定性，以推动其在食品包装领域的工业化应用。

#### 2.4 玉米醇溶蛋白

玉米醇溶蛋白 (zein) 是玉米的主要贮藏蛋白，属醇溶蛋白类。 $\alpha$ -螺旋和 $\beta$ -折叠结构使其具有良好的成膜性和热稳定性。在食品包装中，玉米醇溶蛋白制备的薄膜能有效阻隔氧气和水分，延长食品保质期，因而备受关注。

分子对接与动力学模拟为玉米醇溶蛋白基包装膜的性能优化提供了分子机制支持。Li Y. 等<sup>[44]</sup>利用 AutoDock Vina 研究玉米醇溶蛋白与莲心提取物 (PNE) 生物碱的分子对接 (结合能 -9.1~6.1 kcal/mol)，揭示了氢键和 $\pi$ - $\pi$ 相互作用促进 PNE 在玉米醇溶蛋白中的稳定封装。图 7a~e 中，茶藤素、莲碱、薯花碱、连生碱和异连生碱与玉米醇溶蛋白的特定氨基酸残基形成强结合，增强了 PNE@GZF 复合薄膜的抗菌性和保鲜效果。图 7f 展示薄膜制备过程，PNE 加入玉米醇溶蛋白溶液后与明胶混合浇铸。此膜显著降低草莓质量损失约 50%，延长货架期至 12 d，这表明此薄膜适用于食品包装。M. M. Hajjari 等<sup>[45]</sup>借助 PRISM 服务器对玉米醇溶蛋白与 C- 藻蓝蛋白的三维模型，应用交互距离及力权重参数探究动态，并用结合能检验稳定性。模拟结果显示，玉米醇溶蛋白与 C- 藻蓝蛋白生成复合 (-37.49 kcal/mol)，并在体系中激发协同，这可解析协同效应原理；结合动力学追踪的螺旋 - 线圈转换，精炼电纺参数，

通过浓度及电压调控，提升了纤维亲水度 (接触角 98.7°) 及抗增殖作用 (对 HT-29 细胞显著)。此膜适用于功能食用包装及医疗场景。Wang C. F. 等<sup>[46]</sup>通过 GROMACS 对直链淀粉与玉米醇溶蛋白的三维构象，运用预设条件分析交互，并以氢键计数及构象指标 (RMSD、回转半径 ( $R_g$ )、径向分布函数 (RDF)、主成分分析 (PCA) ) 量化复合稳固性。结果表明，玉米醇溶蛋白极性残基抢夺水氢键，守护直链淀粉 V 型螺旋 (RMSD 为 1.11 nm)，这揭示了氢键强化原理；辅以对接定位交互区 (氢键及疏水)，完善复合策略，降低淀粉消化速率并优化糊化行为。

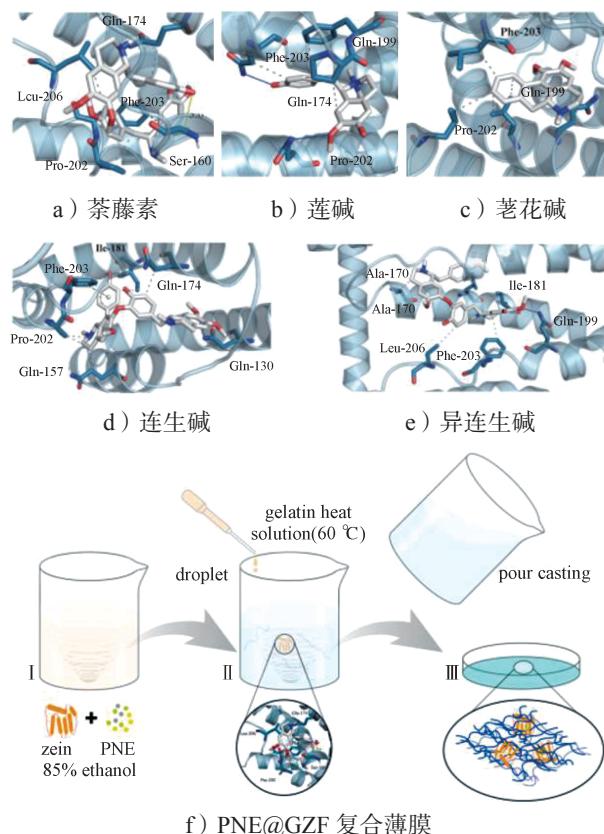


图 7 玉米醇溶蛋白与莲心提取物生物碱的分子对接及复合薄膜制备过程

Fig. 7 Molecular docking of zein with PNE loaded gelatin and the preparation process of composite films

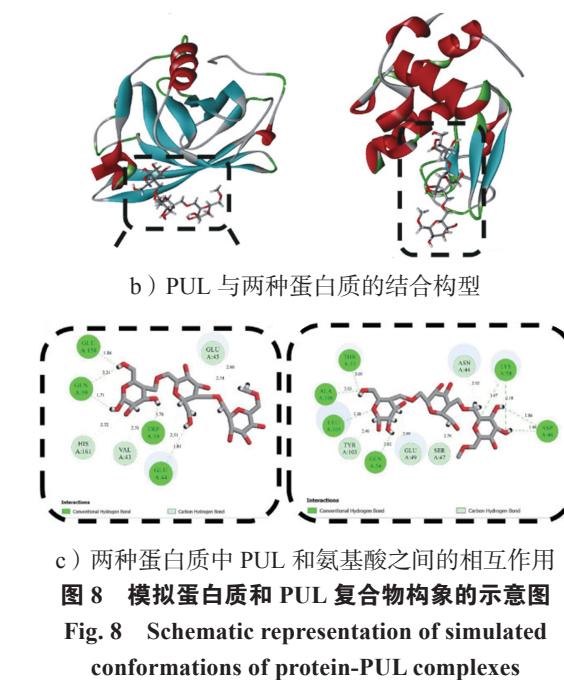
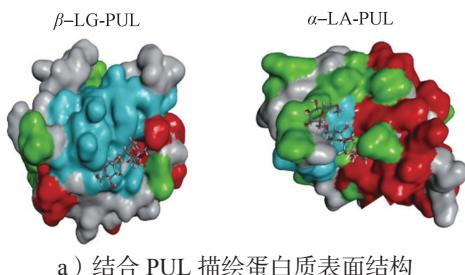
利用分子对接技术揭示玉米醇溶蛋白与功能分子的作用机制，可显著提升包装材料的功能性与稳定性。未来需进一步验证其在实际食品体系中的应用效果，探索环境因素 (如湿度、温度) 对膜性能的影响，并开发高效对接策略以支持规模化生产。

#### 2.5 酪蛋白与乳清蛋白

酪蛋白 (casein) 和乳清蛋白 (whey protein) 是

牛奶中的主要蛋白质。酪蛋白占比 80%，其具有良好的成膜性和乳化性；乳清蛋白占比 20%，其富含人体必需氨基酸，可提供较高的营养价值。两者常用于制备可食用薄膜，此薄膜不仅保护食品，还能增强包装的营养功能，适用于健康食品包装。

利用分子对接技术研究酪蛋白和乳清蛋白与功能分子的相互作用机制，为包装膜优化提供了分子依据。K. Ali 等<sup>[47]</sup>利用 Discovery Studio 模拟乳清蛋白（ $\beta$ -乳球蛋白（ $\beta$ -LG）和  $\alpha$ -乳白蛋白（ $\alpha$ -LA））与普鲁兰多糖（PUL）的结合，以揭示氢键驱动的相互作用促进 PUL:WPI 纳米纤维的形成。如图 8a 所示， $\beta$ -LG 和  $\alpha$ -LA 的表面与 PUL 结合涉及特定氨基酸残基（如  $\beta$ -LG 的 GLU 158、GLN 59 和  $\alpha$ -LA 的 THR 33、ALA 106），形成了稳定的氢键和碳氢键网络（键长 1.67~3.09 Å），进而增强纳米纤维的热稳定性（失重温度 270~420 °C）和疏水性。图 8b 和 8c 展示了 PUL 与  $\beta$ -LG（7 个氨基酸单位）和  $\alpha$ -LA（10 个氨基酸单位）的结合构象。结果显示，PUL:WPI 纳米纤维的 DPPH 清除率增至 29.30%，ABTS 清除率增至 21.35%，总酚含量（TPC）增至 28.39 μg GAE/g，这显著提升了抗氧化性和生物活性递送，此薄膜适用于功能性食品包装。Fang M. H. 等<sup>[48]</sup>利用 AutoDock 对谷蛋白与纳他霉素、茶黄素的三维模型，应用标准参数考察交互，并以结合能评估稳定性。结果显示，麦醇溶蛋白经 3 个氢键与纳他霉素结合（结合能 -7.34 kJ/mol），经 7 个氢键与茶黄素联结（结合能 -4.28 kJ/mol），在复合体中巩固结构，可见氢键和范德华力是主要的结合驱动力；基于交互热点，调控羧甲基壳聚糖薄膜配方，通过比例调整，提升了抗菌潜力（抑制黑曲霉）及抗氧化水平（DPPH 清除率 32.84%）。分子对接技术通过解析酪蛋白和乳清蛋白与抗菌剂、抗氧化剂的相互作用机制，显著提升了膜的热稳定性、抗菌性和保鲜功能，为营养型包装材料设计提供了支持。未来需验证其在复杂食品体系中的稳定性，探索蛋白质协同作用对膜性能的增效机制，并开发多尺度模型以指导工业化应用。



### 3 分子对接技术在应用中的问题与展望

分子对接技术在蛋白质基包装材料，如明胶、大豆蛋白、玉米醇溶蛋白等的开发中展现出显著优势，通过精准预测小分子配体的结合模式，优化了材料的抗菌性、阻隔性和力学性能，为可持续食品包装提供理论支持。然而，应用案例表明，尽管分子对接在揭示蛋白质与功能性分子相互作用机制方面成效显著，但在复杂体系中的实际应用仍面临诸多挑战：1) 在加工过程中，酸碱处理或热处理等操作会引起蛋白质构象改变，例如明胶三股螺旋结构部分解构或大豆蛋白发生变性，这无疑增加了建模难度。然而，现有数据库如 PDB 缺乏加工后蛋白质的结构信息，AlphaFold 对蛋白质无序区域的预测能力亦存在局限性。2) 在固态薄膜环境中，空间位阻及添加剂如甘油或鞣花酸等改变蛋白质微环境，影响结合能预测。此外，pH 值、湿度等环境因素会进一步降低预测精度。例如 AutoDock Vina 在高湿度条件下可能会低估疏水作用。3) 计算结果需要实验验证，因分子对接技术难以捕捉多组分间的协同或竞争作用，例如乙醇与茶多酚之间的竞争，或高亲和力添加剂因溶解性不足而失效的情况。4) 在计算模型方面，刚性或半柔性对接假设忽略了蛋白质的构象变化，而柔性对接的计算成本高，且评分函数在固态环境中精度不足。

5) 在数据资源方面, ZINC20 和 BIOMATDB 等数据库缺乏针对包装材料的特异性数据, 这限制了多尺度建模。

分子对接技术在提升蛋白质基包装材料的抗菌性、阻隔性和可持续性方面具有广阔前景。该技术可以通过优化抗菌剂(如鞣花酸)和抗氧化剂(如姜黄素)的结合模式, 加速绿色包装材料的研发进程。未来, 应聚焦多尺度建模, 结合分子动力学和量子力学方法模拟材料加工后的构象及薄膜的动态行为; 开发适用于固态环境的专用算法, 融入 pH、湿度等因素; 建立标准化验证流程, 量化结合能与拉伸强度、水蒸气渗透率等性能之间的关联; 引入机器学习方法优化评分函数, 构建自动化筛选平台; 整合加工后蛋白质结构与材料性能的专用数据库。以上改进措施将推动分子对接技术在可持续包装领域的精准应用, 为实现环保、高效的“碳中和”包装产业提供关键支撑。

#### 参考文献:

- [1] LI H Z, CHENG H L, CHEN Y, et al. Advances in Solar-Driven, Electro/Photoelectrochemical, and Photothermal-Assisted Upcycling of Waste Plastics[J]. ACS Applied Energy Materials, 2025, 8(7): 4803-4814.
- [2] ANUNOBI T. Hazardous Effects of Plastic Wastes on Land Biodiversity: A Review[J]. Zoologist (The), 2022, 20(1): 80-86.
- [3] AN J H, WU F, WANG D L, et al. Estimated Material Metabolism and Life Cycle Greenhouse Gas Emission of Major Plastics in China: A Commercial Sector-Scale Perspective[J]. Resources, Conservation and Recycling, 2022, 180: 106161.
- [4] JHA S, AKULA B, ENYIOMA H, et al. Biodegradable Biobased Polymers: A Review of the State of the Art, Challenges, and Future Directions[J]. Polymers, 2024, 16(16): 2262.
- [5] MISEREZ A, YU J, MOHAMMADI P. Protein-Based Biological Materials: Molecular Design and Artificial Production[J]. Chemical Reviews, 2023, 123(5): 2049-2111.
- [6] TORRES-GINER S, FIGUEROA-LOPEZ K J, MELENDEZ-RODRIGUEZ B, et al. Emerging Trends in Biopolymers for Food Packaging[M]. Hoboken: Wiley, 2021: 1-33.
- [7] BHASKAR R, ZO S M, NARAYANAN K B, et al. Recent Development of Protein-Based Biopolymers in Food Packaging Applications: a Review[J]. Polymer Testing, 2023, 124: 108097.
- [8] DISSANAYAKE T, VIDANARACHCHI J K, NARVAEZ-BRAVO C, et al. Advances in Protein-Based Materials for Functional Food Packaging[J]. ACS Food Science & Technology, 2025, 5(7): 2604-2617.
- [9] FISCHER E. Einfluss der Configuration auf die Wirkung der Enzyme[J]. Berichte der Deutschen Chemischen Gesellschaft, 1894, 27(3): 2985-2993.
- [10] KUNTZ I D, BLANEY J M, OATLEY S J, et al. A Geometric Approach to Macromolecule-Ligand Interactions[J]. Journal of Molecular Biology, 1982, 161(2): 269-288.
- [11] WU M H, XIE Z Q, ZHI D G. A Folding-Docking-Affinity Framework for Protein-Ligand Binding Affinity Prediction[J]. Communications Chemistry, 2025, 8: 108.
- [12] SAHU M K, NAYAK A K, HAILEMESKEL B, et al. Exploring Recent Updates on Molecular Docking: Types, Method, Application, Limitation & Future Prospects[J]. International Journal of Pharmaceutical Research and Allied Sciences, 2024, 13(2): 24-40.
- [13] AHMAD S, SINGH S, SRIVASTAVA M R, et al. Molecular Docking Simplified: Literature Review[J]. Advances in Medical, Dental and Health Sciences, 2021, 4: 37-44.
- [14] RAVAL K, GANATRA T. Basics, Types and Applications of Molecular Docking: A Review[J]. IP International Journal of Comprehensive and Advanced Pharmacology, 2022, 7(1): 12-16.
- [15] PIERCE B G, WIEHE K, HWANG H, et al. ZDOCK Server: Interactive Docking Prediction of Protein-Protein Complexes and Symmetric Multimers[J]. Bioinformatics, 2014, 30(12): 1771-1773.
- [16] EBERHARDT J, SANTOS-MARTINS D, TILLACK A F, et al. AutoDock Vina 1.2. 0: New Docking Methods, Expanded Force Field, and Python Bindings[J]. Journal of chemical information and modeling, 2021, 61(8): 3891-3898.
- [17] FRIESNER R A, BANKS J L, MURPHY R B, et al. Glide: A New Approach for Rapid, Accurate Docking and Scoring. 1. Method and Assessment of Docking Accuracy[J]. Journal of Medicinal Chemistry, 2004, 47(7): 1739-1749.
- [18] VERDONK M L, COLE J C, HARTSHORN M J, et al. Improved Protein-Ligand Docking Using GOLD[J]. Proteins: Structure, Function, and Bioinformatics, 2003, 52(4): 609-623.
- [19] MEILER J, BAKER D. ROSETTALIGAND: Protein-Small Molecule Docking with Full Side-Chain Flexibility[J]. Proteins: Structure, Function, and

- Bioinformatics, 2006, 65(3): 538–548.
- [20] DOMINGUEZ C, BOELENS R, BONVIN A M. HADDOCK: A Protein-Protein Docking Approach Based on Biochemical or Biophysical Information [J]. Journal of the American Chemical Society, 2003, 125(7): 1731–1737.
- [21] HOU Y, BAI Y Q, LU C, et al. Applying Molecular Docking to Pesticides[J]. Pest Management Science, 2023, 79(11): 4140–4152.
- [22] VILAR S, COZZA G, MORO S. Medicinal Chemistry and the Molecular Operating Environment (MOE): Application of QSAR and Molecular Docking to Drug Discovery[J]. Current Topics in Medicinal Chemistry, 2008, 8(18): 1555–1572.
- [23] MORRIS G M, HUEY R, LINDSTROM W, et al. AutoDock4 and AutoDockTools4: Automated Docking with Selective Receptor Flexibility[J]. Journal of Computational Chemistry, 2009, 30(16): 2785–2791.
- [24] SHEN C, ZHANG X J, HSIEH C Y, et al. A Generalized Protein-Ligand Scoring Framework with Balanced Scoring, Docking, Ranking and Screening Powers[J]. Chemical Science, 2023, 14(30): 8129–8146.
- [25] WANG Z C, ZHENG L Z, WANG S, et al. A Fully Differentiable Ligand Pose Optimization Framework Guided by Deep Learning and a Traditional Scoring Function[J]. Briefings in Bioinformatics, 2023, 24(1): bbac520.
- [26] RAREY M, KRAMER B, LENGAUER T, et al. A Fast Flexible Docking Method Using an Incremental Construction Algorithm[J]. Journal of Molecular Biology, 1996, 261(3): 470–489.
- [27] SPITZER R, JAIN A N. Surflex-Dock: Docking Benchmarks and Real-World Application[J]. Journal of Computer-Aided Molecular Design, 2012, 26(6): 687–699.
- [28] ALLEN W J, BALIUS T E, MUKHERJEE S, et al. DOCK 6: Impact of New Features and Current Docking Performance[J]. Journal of Computational Chemistry, 2015, 36(15): 1132–1156.
- [29] RUIZ-CARMONA S, ALVAREZ-GARCIA D, FOLOPPE N, et al. rDock: A Fast, Versatile and Open Source Program for Docking Ligands to Proteins and Nucleic Acids[J]. PLoS Computational Biology, 2014, 10(4): e1003571.
- [30] ABAGYAN R, TOTROV M, KUZNETSOV D. ICM—A New Method for Protein Modeling and Design: Applications to Docking and Structure Prediction from the Distorted Native Conformation[J]. Journal of Computational Chemistry, 1994, 15(5): 488–506.
- [31] WEI M P, SHAN M, ZHANG L M, et al. Preparation of Gelatin/κ-Carrageenan Active Films Through Procyanidins Crosslinking: Physicochemical, Structural, Antioxidant and Controlled Release Properties[J]. Food Hydrocolloids, 2024, 153: 110023.
- [32] KANG S F, BAI Q B, QIN Y N, et al. Film-Forming Modifications and Mechanistic Studies of Soybean Protein Isolate by Glycerol Plasticization and Thermal Denaturation: A Molecular Interaction Perspective[J]. Food Research International, 2024, 196: 115042.
- [33] 陈景华, 林晨璐, 方应大为, 等. 热致变色材料的变色机理及其在智能包装中的应用 [J]. 包装学报, 2024, 16(6): 81–91.
- [34] BHATIA S, AL-HARRASI A, ALMOHANA I H, et al. The Physicochemical Properties and Molecular Docking Study of Plasticized Amphotericin B Loaded Sodium Alginate, Carboxymethyl Cellulose, and Gelatin-Based Films[J]. Heliyon, 2024, 10(2): e24210.
- [35] NABEEL AHMAD H, YONG Y Y, WANG S C, et al. Development of Novel Carboxymethyl Cellulose/Gelatin-Based Edible Films with Pomegranate Peel Extract as Antibacterial/Antioxidant Agents for Beef Preservation[J]. Food Chemistry, 2024, 443: 138511.
- [36] SUN H H, XIA G L, CAO N, et al. Enhancing Catalytic Efficiency of GAO-5F from Fusarium odoratissimum and Its Application in Development of a Polyaldehyde Crosslinked Gelatin-Based Edible Packaging Film[J]. International Journal of Biological Macromolecules, 2024, 283: 137807.
- [37] YU J T, LI X Y, HUANG J H, et al. Molecular Dynamics Simulation of A-Gliadin in Ethanol/Aqueous Organic Solvents[J]. International Journal of Food Science & Technology, 2023, 58(2): e1–e9.
- [38] HE W J, XU Q D, CHEN N, et al. Establishing a Biodegradable Film with Gluten and Tea Polyphenols: Structure, Properties, and Function[J]. LWT, 2024, 208: 116693.
- [39] GUO Z Q, HUANG Y Q, HUANG J, et al. Formation of Protein-Anthocyanin Complex Induced by Grape Skin Extracts Interacting with Wheat Gliadins: Multi-Spectroscopy and Molecular Docking Analysis[J]. Food Chemistry, 2022, 385: 132702.
- [40] SHEVTSOVA T, IDUOKU K, PATNODE SETIEN K, et al. Enhancing Plant Protein-Based Bioplastics with Natural Additives: Comprehensive Study by Experimental and Computational Approaches[J]. ACS Sustainable Chemistry & Engineering, 2024, 12(43): 15948–15960.
- [41] RANI P, YADAV P K, SINGH A K, et al. Structural, Material and Antibacterial Properties of Quercetin Incorporated Soy Protein Isolate Films and Its Binding Behavior through Molecular Docking[J]. Biopolymers,

- 2024, 115(2): e23569.
- [42] YONG Y Y, WANG S C, LI L H, et al. A Curcumin-Crosslinked Bilayer Film of Soy Protein Isolate and Chitosan with Enhanced Antibacterial Property for Beef Preservation and Freshness Monitoring[J]. International Journal of Biological Macromolecules, 2023, 247: 125778.
- [43] 陈景华, 林旻, 段真利, 等. 改性壳聚糖基抗菌食品包装材料的研究进展[J]. 包装学报, 2023, 15(2): 8-17.
- [44] LI Y, GUO L, YI X H, et al. Fabrication and Characterization of *Plumula nelumbinis* Extract Loaded Gelatin/Zein Films (PNE@GZF) to Prolong Strawberries Shelf-Life[J]. Food Control, 2023, 154: 109989.
- [45] HAJJARI M M, GOLMAKANI M-T, SHARIF N. Electrospun Zein/C-Phycocyanin Composite: Simulation, Characterization and Therapeutic Application[J]. Food Hydrocolloids, 2023, 140: 108638.
- [46] WANG C F, JI N, DAI L, et al. The Mechanism Underlying the Amylose-Zein Complexation Process and the Stability of the Molecular Conformation of Amylose-Zein Complexes in Water Based on Molecular Dynamics Simulation[J]. Foods, 2023, 12(7): 1418.
- [47] ALI K, JIANG B, CHEN J J, et al. Preparation and Structural Characterization of Pullulan and Whey Protein Isolate-Based Electrospun Nanofiber[J]. Food Bioscience, 2023, 56: 103218.
- [48] FANG M H, WANG J L, FANG S, et al. Fabrication of Carboxymethyl Chitosan Films for Cheese Packaging Containing Gliadin-Carboxymethyl Chitosan Nanoparticles Co-Encapsulating Natamycin and Theaflavins[J]. International Journal of Biological Macromolecules, 2023, 246: 125685.

(责任编辑: 邓彬)

## Research on the Application of Molecular Docking Technology in Protein-Based Packaging Materials

CHEN Jinghua<sup>1</sup>, WANG Changsheng<sup>1</sup>, FU Wanying<sup>2</sup>, LUO Yi<sup>1</sup>, SHI Menghan<sup>1</sup>

(1. College of Communication and Art Design, University of Shanghai for Science and Technology, Shanghai 200093, China;

2. Shanghai Publishing and Printing College, Shanghai 200093, China)

**Abstract:** The traditional optimization methods for protein-based packaging materials are plagued by limitations of low efficiency and high cost in meeting the requirements of sustainable packaging. To address this challenge, researchers have introduced molecular docking technology, which can efficiently simulate the interactions between proteins and functional molecules. This technology not only helps to improve the performance of materials, but also provides a scientific theoretical basis for experimental design. In addition, the combination of simulation and experimental verification shows remarkable advantages in enhancing the antibacterial, barrier and mechanical properties of protein-based packaging materials. The application framework of molecular docking technology in protein-based packaging materials is reviewed, and the research results of simulation analysis and experimental verification in gelatin, soy protein, zein, gliadin, as well as casein/whey protein are systematically summarized. Future research priorities should focus on developing higher-precision prediction models, realizing multi-scale simulations, and deepening the integration of simulation and experiments, so as to further promote the intelligent development and industrial application of protein-based packaging materials.

**Keywords:** molecular docking technology; protein-based packaging material; edible film; sustainable packaging