

清華大學創建全球第一個胜肽設計資料庫



國立清華大學
NATIONAL TSING HUA UNIVERSITY

2022 首頁故事

清華大學創建全球第一個胜肽設計資料庫

胜肽近年當紅，許多保健食品及保養品都應用了這種短鏈蛋白質，並強調分子小、更好吸收。本校分子與細胞生物研究團隊研發出全球第一個以分子動力學為基礎的新型胜肽設計資料庫，好比高效率的藥物設計 google 搜尋引擎，可幫助學界、醫界及藥廠設計出更有效、且不傷害人體的新型胜肽藥物。

這個治療用的胜肽設計資料庫由本校生物資訊與結構生物研究所楊立威所長創建，團隊中的清華分子與細胞生物研究所藍忠昱特聘教授、傅化文教授應用資料庫，找到了可診斷幽門桿菌、對抗致病性白色念珠菌及大腸桿菌、及抗肝癌病變的胜肽，並投入實驗證實其功效。這項研究成果最近登上國際頂尖期刊「自然通訊」(Nature Communications)。

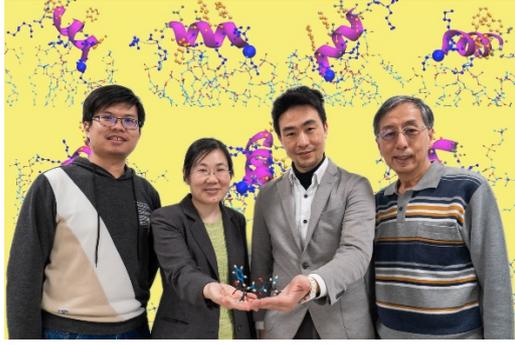
胜肽是由蛋白質最小的組成分子胺基酸所組成，由 2 個胺基酸組成的稱為二胜肽，3 個胺基酸組成則稱三胜肽，依此類推，可有殺菌、調控免疫反應等多種功能，並已應用在治療糖尿病等疾病藥物。但過去胜肽藥物的開發就像在成千上萬的胺基酸序列組合中亂槍打鳥，必須逐一實驗才知是否有效或對人體有害。

楊立威所長從已有的蛋白質資料庫裡提取了 170 萬條的 α 螺旋狀胜肽，透過分子動力學的電腦模擬，找出其中的規則性；在設計如抗菌功能的胜肽時，只要輸入關鍵字，如 AxxBxxC (A、B、C 為已知有重要功能的胺基酸，x 可為任何胺基酸)，數據庫即可預測出最符合研究人員需求結構與功能的胜肽序列。

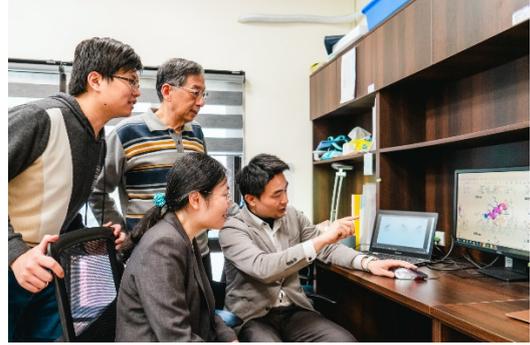
作為團隊中的微生物學專家藍忠昱老師，進一步以實驗來證明電腦選的胜肽真的有效。結果證實資料庫選出來的殺菌胜肽在對抗白色念珠菌及有害細菌上具有更好的功效，且不易造成紅血球破裂，安全性也因此提昇。

本校生物化學專家傅化文老師指出，應用資料庫不僅能設計出治療效果更好的胜肽，也可應用於疾病診斷，團隊就利用資料庫找到了胃部幽門螺旋桿菌蛋白中的一段胜肽，可被市售抗體辨識，這個抗體因此有機會發展出新的診斷及治療用途。不僅如此，團隊發展的演算法，也找到了具治療新冠肺炎潛力的胜肽。

楊立威所長指出，這套胜肽資料庫研發成果除提供學術界作為設計新型胜肽的重要平台，未來也可提供生技及醫療產業用於藥物、化妝保養品、漱口水、隱形眼鏡藥水、牙膏等產品開發，用途十分廣泛。



本校跨領域團隊蔡政育同學（左起）、傅化文教授、楊立威所長、藍忠昱特聘教授，研發胜肽資料庫。



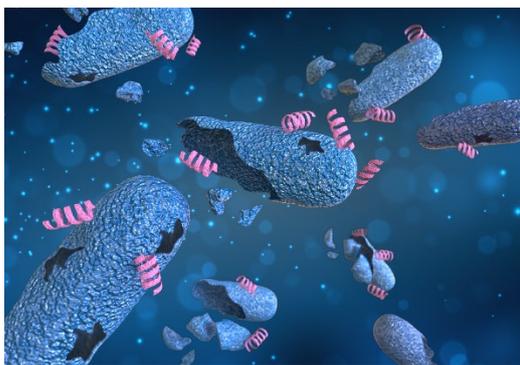
本校研究團隊蔡政育同學（左起）、藍忠昱特聘教授、傅化文教授、楊立威所長開發新型胜肽資料庫。



本校楊立威所長（左）與傅化文教授討論應用分子動力學進行電腦模擬。



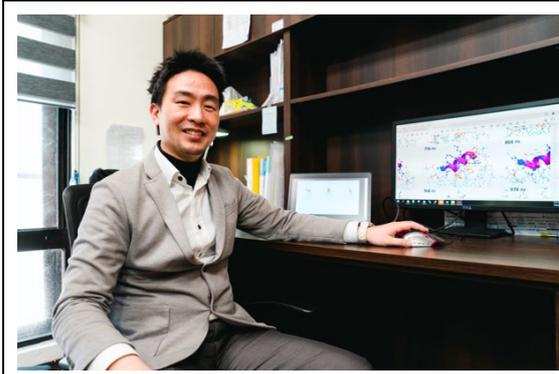
本校研究團隊藍忠昱特聘教授（左起）、傅化文教授、楊立威所長、蔡政育同學開發新型胜肽資料庫。



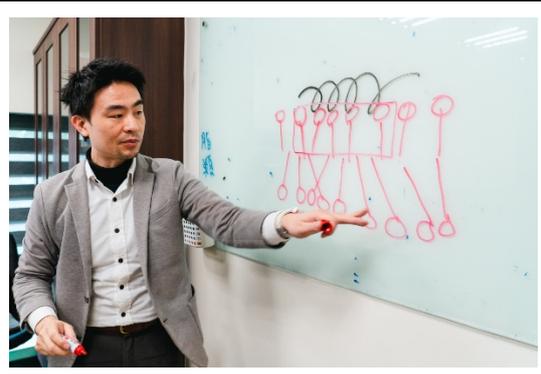
新設計的胜肽（桃紅色）抗大腸桿菌（藍色）效果更佳。



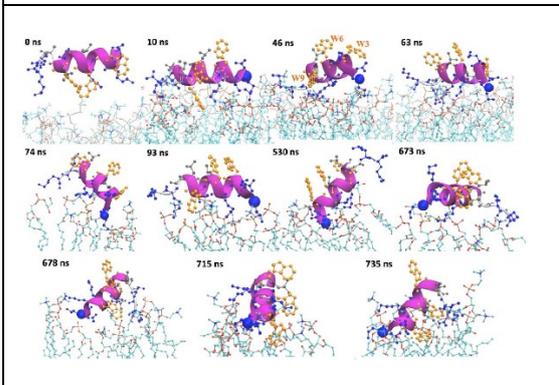
本校研究團隊藍忠昱特聘教授（左起）、傅化文教授、楊立威所長開發新型胜肽資料庫。



本校生物資訊與結構生物研究所楊立威所長創建治療用的胜肽設計資料庫。



楊立威所長解釋螺旋狀胜肽插入磷脂質層膜的過程。



胜肽資料庫內不同條螺旋狀胜肽與磷脂層膜作用。

