
AI模型基于蛋白质的运动方式生成新型蛋白质

作者：writer 来源：科学网

本文原地址：<https://www.iikx.com/news/progress/38998.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！

AI模型基于蛋白质的运动方式生成新型蛋白质。蛋白质远不止是我们在食品标签上关注的营养物质。它们存在于我们身体的每一个细胞中，像自然界的分子机器一样工作。它们行走、伸展、弯曲和以执行其功能，泵送血液、对抗疾病、构建组织，以及完成许多肉眼无法看到的其他工作。它们的能力不仅仅来自形状，更来自它们如何运动。

近年来，人工智能已使科学家能够设计出自然界中不存在的全新蛋白质结构，这些结构针对特定功能进行了定制，例如结合病毒，或为可持续材料模仿丝绸的机械性能。但仅针对结构进行设计，就像制造了一个车壳却无法控制发动机的性能。蛋白质的细微振动、位移和机械动力学对其功能而言，与其形态同样关键。

近日，美国麻省理工学院的科研人员通过开发一种名为VibeGen的AI模型，朝着弥合这一差距迈出了重要一步。如果说氛围编码让程序员描述他们想要什么，然后AI生成软件，那么VibeGen对有生命的分子做着同样的事情：指定你想要的运动模式，然后模型就会编写出蛋白质。3月24日，相关研究结果发表于《物质》，介绍了这一项方法如何使用生成式AI来创建具有定制动力学的蛋白质。

了新可能。图源：MIT

~~这种新模型使科研人员能够针对蛋白质如何弯曲、振动以及如何响应环境而在不同形态间转换进行设计，开启了分子力学设计的新前沿。~~

在基础分子层面，生命的本质不仅在于结构，更在于运动。论文通讯作者、麻省理工学院教授Markus Buehler表示。从蛋白质折叠到材料在应力下的形变，一切都遵循基本物理定律。

AI必须超越分析静态形态，去理解结构和运动是如何从根本上相互交织的。Buehler补充道。

通过使研究人员能够将运动作为直接设计参数进行指定，VibeGen不再将蛋白质视为静态形状，而更像是可编程的机械装置。这一进展连接了人工智能、医学、合成生物学和材料工程领域，朝着一个未来迈进。在那个未来里，分子机器可以像设计桥梁、发动机或微芯片一样，拥有同样的精确度和目的性。

VibeGen可以探索未知领域，提出超越进化谱系的蛋白质设计，完全按照我们的规格进行定制。这就像我们发明了一种新的创意引擎，能够按需设计分子机器。Buehler补充道。

研究人员计划进一步完善该模型，并在实验室中验证他们的设计。他们还希望将运动感知设计与其它AI工具集成，朝着能够设计出不仅具有动态性、还具有多功能性的蛋白质系统迈进。这些蛋白质能够感知环境、响应信号并实时适应。（来源：中国科学报 张晴丹）

相关论文信息：<https://doi.org/10.1016/j.matt.2026.102706>

作者：Markus Buehler 来源：《物质》

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