科研人员开发用于蛋白质界面设计的原子互作生成模型

作者：writer 来源：中国科学院

本文原地址：https://www.iikx.com/news/progress/40293.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！

科研人员开发用于蛋白质界面设计的原子互作生成模型。精准预测蛋白质—蛋白质/药物在原子层面的相互作用，并通过蛋白质设计技术调控这些相互作用，在加速疗法开发和解决未满足的医疗需求方面具有潜力。随着腺相关病毒和mRNA脂质纳米颗粒

生成式AI框架已加速特定结构表位的从头蛋白质设计，但多数方法仍遵循自上而下的设计策略。

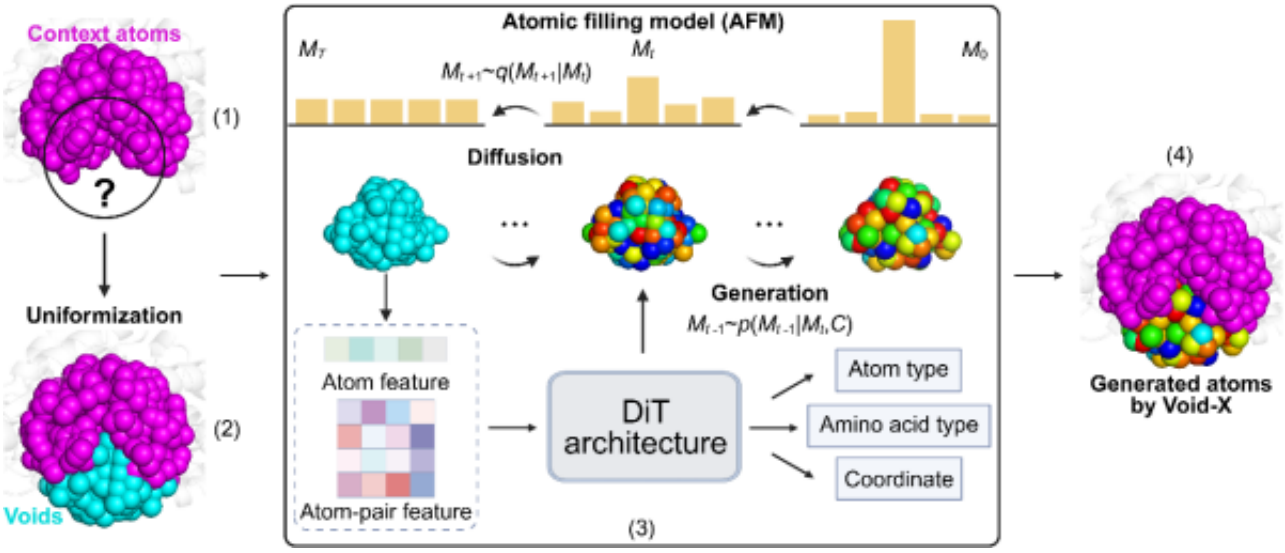
近日，中国科学院上海有机化学研究所开发了原子互作生成模型Void-X，采用自下而上的范式设计蛋白质界面。不同于现有方法先设计整体蛋白质形状，Void-X能够针对特定结构区域直接生成与之匹配的互作原子分布，为蛋白质—蛋白质界面设计奠定了物理可解释的基础。

Void-X作为一种原子填充模型，旨在捕捉原子尺度的相互作用模式，并填补蛋白质界面中的原子空位。为了训练该模型，研究团队在蛋白质数据库中筛选并构建了超过800万个球形原子簇。在每个原子簇中，约30%位于外围且空间中连续的原子被掩码以待生成，其余原子则作为上下文信息。Void-X拥有1.7亿个参数，在蛋白质链内原子簇预测任务中的准确率达78.3%，在蛋白质链间原子簇预测任务中的准确率达68.2%。

凭借这些优势，Void-X能够直接生成原子级别的蛋白质相互作用，为蛋白质设计开辟了新路径。该模型将原子层面的精细信息与生成模型融为一体，丰富了生物分子界面的理性设计手段，在药物研发等领域应用广阔。

相关研究成果发表在《美国国家科学院院刊》（*PNAS*）上。研究工作得到国家自然科学基金委员会和中国科学院等的支持。

论文链接



Void-X原子填充模型训练流程图

研究团队单位：上海有机化学研究所

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转发