



生物資訊及系統生物研究所

電話：03-5712121 轉 (O) 59716 (Lab) 59717

E-mail：chiangyc@nycu.edu.tw

實驗室：理論分子科學研究室

(Theoretical Molecular Science Group)

實驗室網頁：<https://yccgroup.github.io/>



江瑛芝 副教授

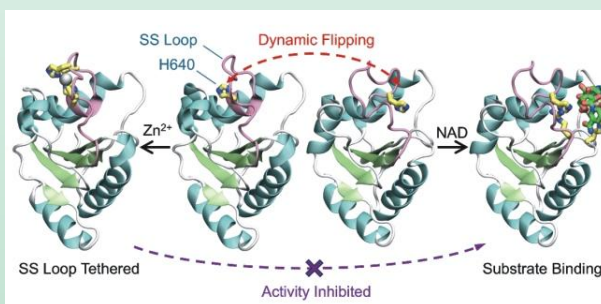
研究興趣

• 創新的演化學習平台研究興趣：以物理為基礎、結合 AI 輔助之分子建模與藥物設計

本研究室以理論分子科學為核心，發展並應用物理基礎與 AI 輔助的計算方法，理解生物分子系統中的結構與功能關係，並將這些知識應用於重要疾病與藥物設計問題。我們關注的不只是「能否預測」分子功能，更重視預測背後的物理意義與分子機制。因此，本研究室結合分子動力學模擬、自由能計算、分子對接、結構建模、機器學習與深度學習方法，建立可解釋、可驗證且可回饋設計的計算架構。

第一個主要研究方向是微生物抗藥性與抗菌肽設計。具抗藥性細菌與高致病性病毒的快速擴散已成為全球公共衛生的重要挑戰。抗菌肽因其多樣的作用機制與廣泛的抗菌、抗病毒、抗真菌等潛力，受到高度關注。然而，其臨床發展仍面臨活性、選擇性、穩定性與毒性之間的平衡問題。為了加速抗菌肽的發現與優化，我們發展 AI 模型，用於辨識抗菌肽、預測其對不同細菌物種的活性，以及評估其活性強度。同時，我們也關注抗菌肽的安全性問題，並建立計算模型以預測肽對紅血球膜的破壞風險。透過整合序列特徵、物理化學性質、結構資訊與實驗資料，我們希望建立能同時考慮高抗菌活性、低毒性與良好穩定性的抗菌肽設計平台，為對抗微生物感染提供新的分子設計策略。

第二個研究方向是神經退化疾病相關分子機制。許多神經退化疾病與軸突退化、細胞能量失衡及關鍵酵素活性調控密切相關。我們近期特別關注 SARM1，這是一個與軸突退化密切相關、具有 NADase 活性的促退化蛋白。透過分子動力學模擬並結合實驗合作，我們研究 SARM1 催化活性如何受到局部結構動態調控。如圖所示，SARM1 TIR domain 中 SS loop 的構形轉換，特別是關鍵殘基的翻轉，對 NAD 招募與催化反應至關重要，而鋅離子可限制此 loop 的動態，進而抑制 SARM1 活性。這類研究說明，蛋白質的功能不僅由靜態結構決定，也深受局部動態與構形集合控制，並為新型治療策略提供分子層次的基礎。



長期而言，本研究室希望建立一個連結物理化學、分子模擬、人工智慧與生物醫學應用的研究平台。我們相信，未來的分子醫學與藥物設計不應依賴黑箱式預測，而需要將 AI 模型與分子機制、統計力學與實驗驗證緊密結合。透過這樣的研究方向，我們期望培養具備物理、化學、程式設計與生物醫學視野的學生，並推動理論分子科學在微生物感染、神經退化疾病與其它藥物設計中的實質應用。