



2020. 5. 27.(수)

문의 : 02-880-9197

연구책임자 화학부 석차옥 교수(02-880-8161) / 교신저자

서울대 연구팀, 코로나19 감염의 관문이 되는 바이러스 단백질을 컴퓨터로 연구

□ 내용 1

- 코로나19 바이러스가 인체에 침입하는 데 첫 관문을 뚫기 위해 사용하는 단백질이 바이러스 표면에 붙어 있는 스파이크 단백질이다. 서울대학교 화학부 석차옥 교수팀은 미국 리하이 대학의 임원필 교수팀, 영국 케임브리지 대학의 트리스탄 크롤 박사와 함께 최초로 이 스파이크 단백질의 전체 삼차원 구조를 컴퓨터로 시뮬레이션하기 위한 발판을 마련하였다. 이번 연구결과를 바탕으로 하여 컴퓨터로 스파이크 단백질이 어떻게 인체에 침입하는지 가상실험을 할 수 있고, 이 단백질의 활동을 어떻게 억제할 수 있는지 가상으로 시뮬레이션하여 코로나19 치료제를 개발할 수 있는 현실적인 길이 열렸다. 이렇게 컴퓨터 시뮬레이션을 이용한 연구방법은 향후 치명적인 바이러스 변이가 일어났을 때 신속하게 대처할 수 있는 훌륭한 연구 도구이다.
- 기존에 극초저온 현미경으로 스파이크 단백질의 삼차원 구조를 밝혔으나, 그 구조는 여러 부분이 불완전하고, 단백질 표면에 있어야 할 당분자는 일부만 있으며, 단백질이 뿌리를 내리고 있는 바이러스 외피 구조는 밝혀져 있지 않다. 서울대학교 우현욱, 박태용 연구원은 극초저온 현미경 구조에서 시작하여 스파이크 단백질 전체의 삼차원 구조를 예측하였다. 이 예측에는 서울대 화학부에서 자체 개발한 GALAXY 단백질 분자 모델링 프로그램이 사용되었다. 트리스탄 크롤 박사는 ISOLDE

프로그램으로 극초저온 현미경으로 얻은 전자밀도를 참고하여 구조를 정밀화하였고, 임원필 교수팀은 자체 개발한 CHARMM-GUI 웹서버를 사용하여 단백질 구조에 당 분자를 붙이고 바이러스 외피막의 구조를 만들었다. 당 분자와 바이러스 외피막을 포함한 스파이크 단백질의 전체 구조는 한국과학기술정보연구원 (KISTI)의 슈퍼컴퓨터 누리온에서 분자 시뮬레이션을 돌려 안정성을 확인하였다.

- 현재 누리온에서는 스파이크 단백질의 특성을 자세히 분석하기 위한 시뮬레이션이 계속 돌아가고 있으며, 이 시뮬레이션 연구가 끝나기 전에도 전 세계 과학자들이 바이러스 치료제 개발 및 백신 연구에 활용할 수 있도록 시뮬레이션에 사용된 초기 구조를 바이오 아카이브에 사전 공개하였다. 이 초기 구조 완성과 관련된 연구내용은 미국 물리화학 B 학술지에 심사 중이며, 그 중요성과 파급효과를 인정받아 표지논문으로 출판될 예정이다.

(바이오 아카이브 논문 주소: <https://doi.org/10.1101/2020.05.20.103325>)

- [붙임] 1. 연구결과 2. 용어설명 3. 그림설명 4. 논문 초본(최종수정전)
5. 연구진 이력사항

연구결과

Modeling and Simulation of a Fully-glycosylated Full-length SARS-CoV-2 Spike Protein in a Viral Membrane

Hyeonuk Woo, Sang-Jun Park, Yeol Kyo Choi, Taeyong Park, Maham Tanveer, Yiwei Cao, Nathan R. Kern, Jumin Lee, Min Sun Yeom, Tristan Croll*, Chaok Seok*, Wonpil Im*

(bioRxiv)

코로나19 감염의 원인이 되는 SARS-CoV-2 바이러스의 표면에 있는 스파이크 단백질의 전체 삼차원 구조를 완성하여 향후 분자 시뮬레이션 연구를 위한 기틀을 마련하였다. 스파이크 단백질의 전체 구조에, 알려진 당분자를 모두 붙이고, 바이러스 외피까지 포함한 시뮬레이션 시스템을 완성하여 공개함으로써, 코로나19 예방과 치료를 위한 연구에 사용될 수 있게 하였다.

용 어 설 명

1. SARS-CoV-2 바이러스

- 코로나 바이러스 감염증 19를 일으키는 원인 바이러스로, 과거 사스를 일으키는 바이러스 (SARS-CoV)와의 유사성 때문에 그 변종으로 이름지어졌다.

2. 스파이크 단백질(Spike protein)

- 코로나 바이러스의 표면에서 뿔족 나와 있는 모양의 단백질로, 인간 세포에 침입하는 역할을 한다. SARS-CoV-2의 스파이크 단백질은 사스를 일으키는 SARS-CoV 바이러스의 스파이크 단백질에서 몇 개의 아미노산이 변이되어 인체 침입성이 훨씬 높아졌다.

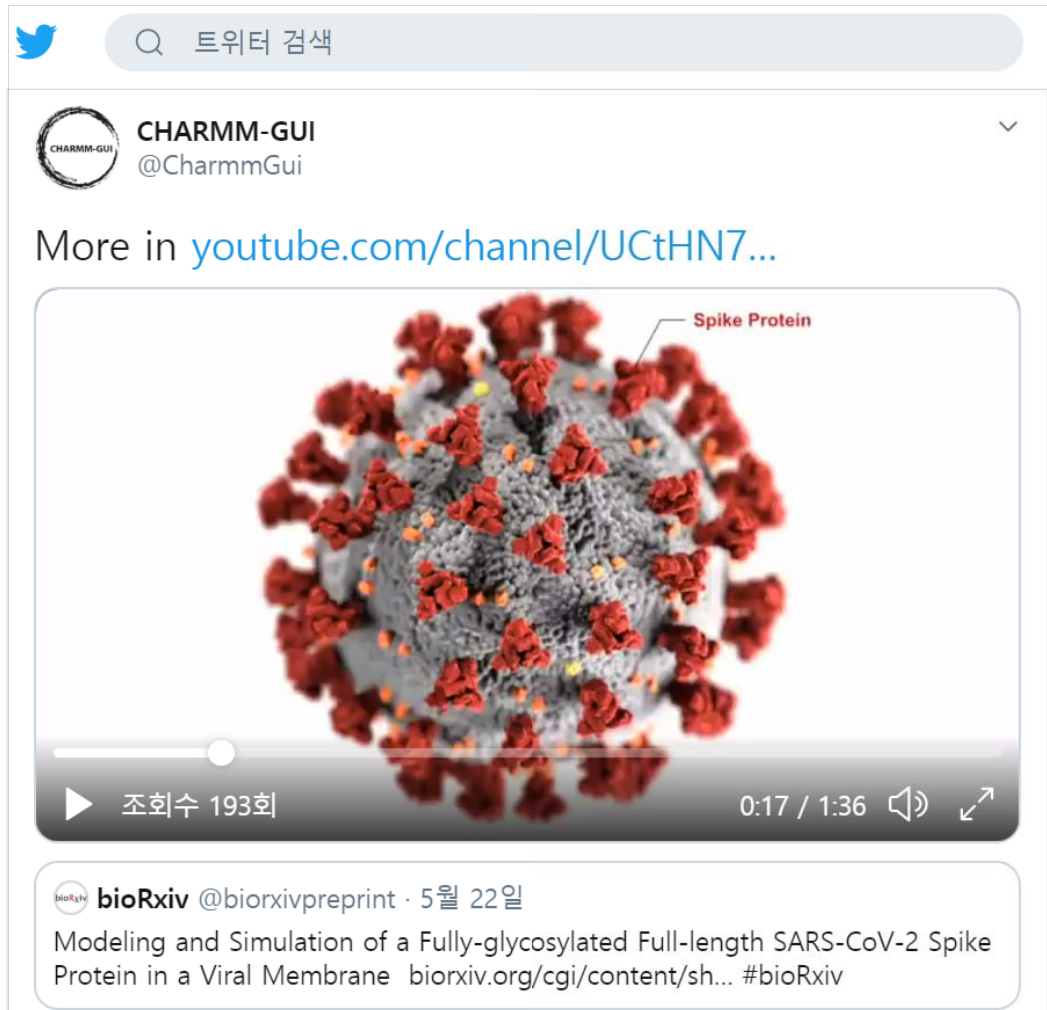
3. 당 분자 (Glycan, polysaccharide)

- 세포 표면에 있는 단백질에 붙어 있는 당 분자는 여러 생물학적 역할을 하는데, 바이러스 표면의 당 분자는 인간 세포의 당 분자를 사용하여 바이러스 단백질을 감싸고 있어, 치료제 및 백신 개발에 고려해야 할 중요한 요소이다.

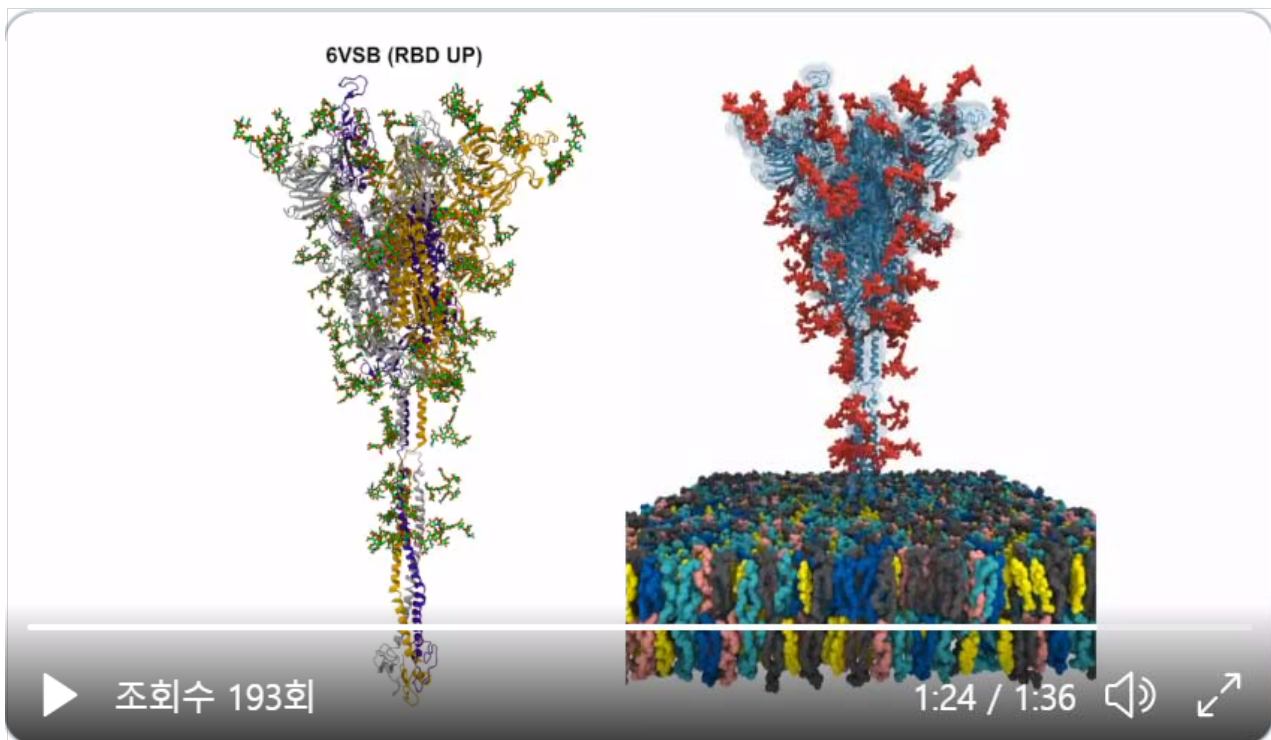
그림 설명

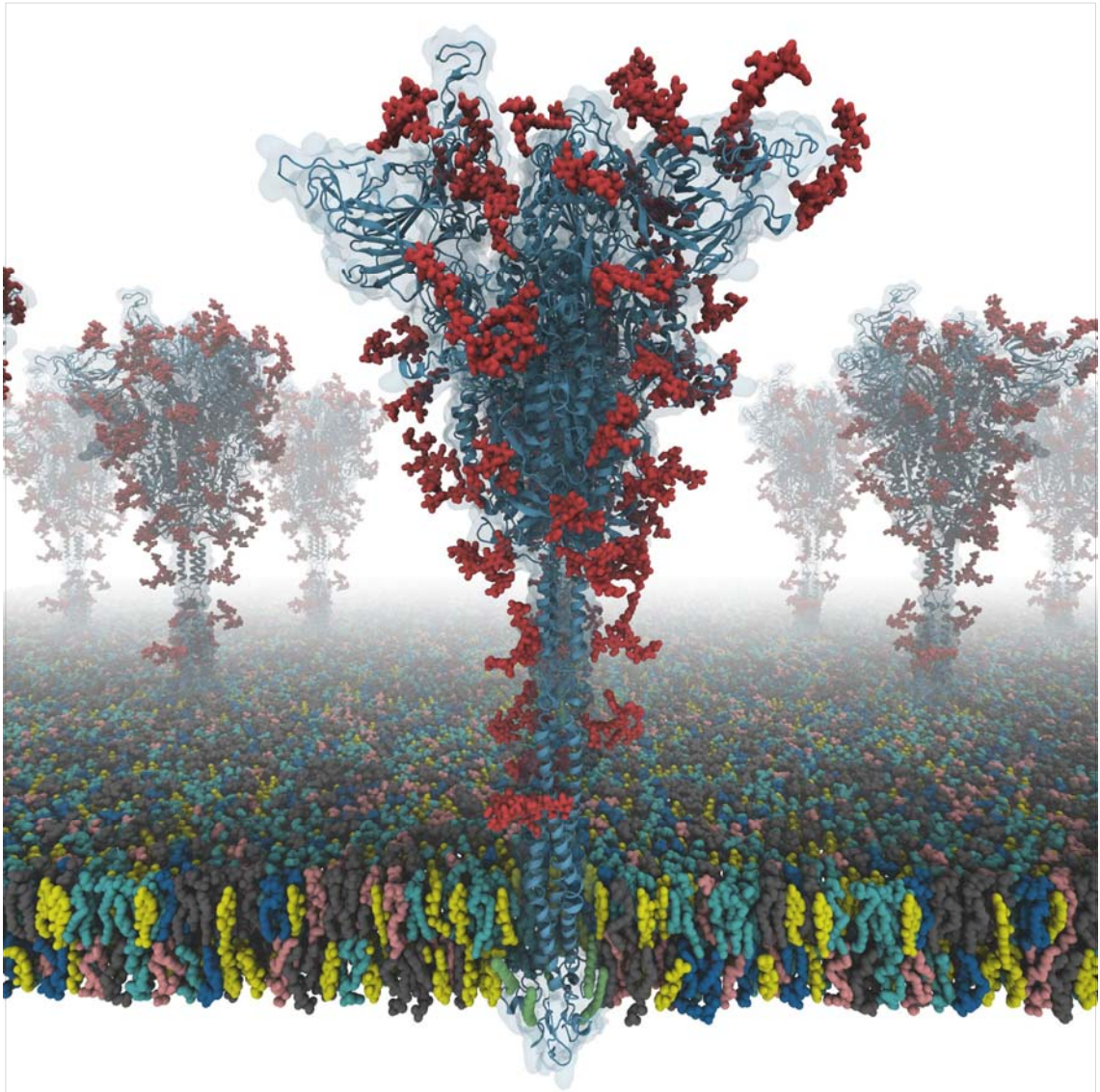
□ CHARMM-GUI 트위터 캡처

(<https://twitter.com/CharmmGui/status/1263842210488909824>)



The image is a screenshot of a Twitter post. At the top, there is a search bar with the text "트위터 검색" (Twitter Search). Below the search bar is the profile information for CHARMM-GUI (@CharmmGui). The main content of the tweet is a video player showing a 3D model of a SARS-CoV-2 virus. The model consists of a grey, textured spherical core surrounded by numerous red, spike-like structures. A label "Spike Protein" with a line pointing to one of the red structures is visible in the upper right corner of the video frame. Below the video player, there is a play button icon, the text "조회수 193회" (Views 193), and a progress bar showing "0:17 / 1:36". To the right of the progress bar are icons for volume and sharing. Below the video player is a bioRxiv preprint notice: "bioRxiv @biorxivpreprint · 5월 22일" followed by the title "Modeling and Simulation of a Fully-glycosylated Full-length SARS-CoV-2 Spike Protein in a Viral Membrane" and a link to the preprint content, along with the hashtag #bioRxiv.





연구자 이력사항

1. 인적사항

- 성명 : 석 차 옥
- 소속 : 서울대학교 화학부 교수
- 전화 : 02-880-9197
- E-mail : chaok@snu.ac.kr



2. 학력

- 1989 - 1993 서울대학교 학사
- 1994 - 1998 시카고대학교 박사

3. 경력사항

- 2004 - 서울대학교 화학부 조교수, 부교수, 교수
- 2008 - 2010 고등과학원 계산과학부 겸임교수
- 2000 - 2004 UCSF 약학화학과 연구원
- 2000 MIT 화학과 연구원
- 1999 시카고대 화학과 연구원