

# 建構海洋天然物 3D 結構資料庫之研究

黃冠瑄

## 摘要

海洋天然物為大自然的珍貴資源，其中一些化合物具有癌細胞毒殺活性。建立海洋天然物 3D 資料庫，將來可以透過電腦評估細胞受體結合部位，找出可能作用機制。資料庫建立的方式除了結構的轉換、除錯及修正外，可配合計算化合物分布的最低能量，找到最穩定的結構。目前已建立 114 個化合物資料庫，未來持續增加資料量，以供日後研究使用。