



電腦輔助新藥開發平台

意者請洽 

研發團隊

清華大學 楊立威老師 / 普睿思股份有限公司

技術類別

新藥開發、老藥新用

技術簡介

考慮蛋白質構型變化、體溫下分子動態及 AI 建模的新藥開發平台能針對蛋白質的多個可藥點設計新藥及具協同作用的老藥，AlphaFold2 亦已整合進入此平台，為結構未定的基因進行藥物篩選。

此平台針對單一蛋白質的多個可藥位點（活性位，異構調控位，跟蛋白質結合介面）去設計新藥及篩選具協同作用的老藥，而一般電腦篩藥方法通常只針對活性位點。蛋白質動力學 (MD) 模擬除了提供在水溶液下鬆弛的幾個代表性結構與 x-ray 結構一起來進行篩藥，篩藥過程中的體溫下的分子結合力亦由 MD 來評估，而不只是當作 AI 設計出的藥物 - 蛋白結合力的驗證工具。在跟西南醫藥大學合作的案子中，利用我們的篩藥平台所設計的新藥和再利用的老藥與 Atomwise Inc 所篩選出來的 80 種化合物相比，針對 TNBC 的靶點特异性以及抗腫瘤表現更好，我們的新藥的 IC50 為 20nM，而 Atomwise 表現最好的化合物之 IC50 為 2500nM。

應用領域

虛擬藥物篩選、新藥開發、蛋白質動力學、藥效團優化

