虚拟药物扫描识别出潜在新抗抑郁药物

作者：writer 来源：爱科学

本文原地址：https://www.iikx.com/news/progress/20298.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！

虚拟药物扫描识别出潜在新抗抑郁药物。科学家报道了两种LSD（麦角酸二乙基酰胺）类似物化学分子在小鼠中具有抗抑郁作用，但没有致幻的副作用。虽然还需进一步测试才能确定它们可否作为人类的候选药物，但这些药物的发现或可导向未来治疗精神障碍的药物开发。相关研究近日发表于《自然》。

如LSD和裸盖菇素等致幻剂已知可以针对特定的血清素（serotonin）受体，被认为可作为精神障碍（如精神分裂症、抑郁和焦虑）的替代治疗手段。但是还不清楚是否可以开发不带有致幻作用的此类有疗效化合物。开发类似LSD而没有致幻作用的治疗药物，是治疗精神障碍的一个有吸引力的目标。虚拟筛选是一种预测药物活性的计算机方法，可以用于找出靶向血清素受体的有趣化合物。

美国加利福尼亚州立大学的Brian Shoichet、Jon Ellman、Bryan Roth和同事创建了一个定制虚拟库，包括了7500万种四氢吡啶（tetrahydropyridines）家族（在LSD中亦发现此家族成分）的分子，对其进行虚拟测试，以识别它们是否能够与血清素受体相互作用。

他们发现了两种分子可以激活血清素受体，并在小鼠中进行了测试。这些分子对小鼠有抗抑郁作用而无致幻作用。此外，这些分子与抗抑郁药氟西汀一样有效，但所需剂量低40倍。

研究者提出，这些分子需要进一步的研究和优化，才能考虑作为候选药物。这些发现展现出了定制筛选库在识别新药线索方面的潜力。（来源：中国科学报冯维维）

相关论文信息：https://doi.org/10.1038/s41586-022-05258-z

作者：Brian Shoichet 来源：《自然》

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