
人工智能发现可杀死耐药细菌的新型抗生素

作者：writer 来源：科学网

本文原地址：<https://www.iikx.com/news/progress/25558.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！

人工智能发现可杀死耐药细菌的新型抗生素。人工智能帮助研究人员发现了一类新的抗生素，可以治疗由耐药细菌引起的感染。这可能有助于对抗抗生素耐药性，2019年抗生素耐药性导致120多万人死亡，预计未来几十年这一数字还会继续上升。12月20日，相关成果发表于《自然》。

耐甲氧西林金黄色葡萄球菌。图片来源：Shutterstock/KaterynaKon

在老鼠身上进行的测试表明，新的抗生素化合物被证明有希望治疗耐甲氧西林金黄色葡萄球菌（MRSA）和耐万古霉素肠球菌，后者是一种对通常用于治疗MRSA感染的药物产生耐药性的细菌。

美国博德研究所的FelixWong说：我们的人工智能模型不仅告诉我们哪些化合物具有抗生素活性，而且还从它们的化学结构方面告诉了我们为什么。

Wong和同事首先测试了3.9万多种化合物对金黄色葡萄球菌和3种人体细胞的影响，这3种细胞分别来自肝脏、骨骼肌和肺部。这些结果成为人工智能模型了解每种化合物的化学原子和化学键模式的训练数据。这使得人工智能能够预测这些化合物的抗菌活性及其对人体细胞的潜在毒性。

接着，经过训练的人工智能模型通过计算机模拟分析了1200万种化合物，找到了3646种具有理想药物性质的化合物。额外的计算确定了可以解释每种化合物性质的化学亚结构。

通过比较不同化合物中的这些亚结构，研究人员确定了新的潜在抗生素类别，并最终发现了两种能够杀死MRSA和耐万古霉素肠球菌的无毒化合物。

最后，研究人员利用小鼠实验证明了这些化合物在治疗MRSA引起的皮肤和大腿感染方面的有效性。

论文作者之一、博德研究所的James Collins说，只有少数新种类的抗生素，如恶唑烷酮类抗生素和脂肽类抗生素，被发现对MRSA和耐万古霉素肠球菌都有效，而且对这些抗生素的耐药性一直在增强。我们的研究发现了一种新型抗生素，这是60年来为数不多的抗生素之一，可以作为其他抗生素的补充发挥作用。

研究人员已经开始使用这种人工智能指导的方法来设计全新的抗生素，并发现其他新的药物类别，例如选择性杀死老化、受损细胞的化合物，这些细胞与骨关节炎和癌症等疾病有关。（来源：中国科学报 文乐乐）

相关论文信息：<https://doi.org/10.1038/s41586-023-06887-8>

作者：James Collins 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](https://www.iikx.com)转发