AI技术助力膜蛋白靶点计算药物开发

作者：writer 来源：科学网

本文原地址：https://www.iikx.com/news/progress/26271.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！

AI技术助力膜蛋白靶点计算药物开发。近日，中国科学院深圳先进技术研究院计算机辅助药物设计研究中心首席科学家、深圳理工大学（筹）药学院讲席教授Horst Vogel团队与合作团队在《自然—生物技术》上发表综述文章。

该文章回顾了计算工具在药物发现中的应用，讨论了目前AI技术以及冷冻电镜技术的发展对药物研发，尤其是以膜蛋白为靶标的药物研发所造成的影响。

人类蛋白质中约三分之一为膜蛋白，其中G蛋白偶联受体(GPCR)和通道蛋白最为丰富，对细胞信号传导和病理生理过程至关重要，因此膜蛋白成为大多数药物开发的靶点。

全新药物的开发通常伴随着巨大的时间和金钱成本，文章讨论了计算生物学和结构生物学的一些最新进展，并提出了四个问题，包括膜蛋白结构的预测精度、计算工具如何加速药物设计、机器学习如何加速和扩大膜蛋白结构生物学工具箱以及计算生物学方法的可靠性等问题。

针对这些问题，文章详细介绍了如深度学习、化学筛选、计算机辅助化学合成规划、机器学习等相关的计算方法和实验技术，并强调了这些方法在膜蛋白结构和功能研究中的应用潜力，认为这些技术有望显著缩短药物开发的时间并降低成本。

随着计算方法和人工智能在药物开发中的应用日益增多，许多初创公司和大型科技公司都在利用人工智能加速药物开发。尽管在膜蛋白方面的应用仍处于早期阶段，但这些成果将为未来的药物开发提供了巨大的潜力。

此外，文章也强调了湿实验研究和计算工具的相互配合在药物开发中的重要性，发挥计算工具在数据处理和预测方面的优势，以及湿实验在实验验证和深入探究方面的优势，从而更快、更有效地发现和开发新的药物。（来源：中国科学报 刁雯蕙）

相关论文信息：https://doi.org/10.1038/s41587-023-01987-2

作者：Horst Vogel 来源：《自然—生物技术》

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