科研人员发布新型代谢产物鉴定工具

作者：writer 来源：中国科学院

本文原地址：https://www.iikx.com/news/progress/35936.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！

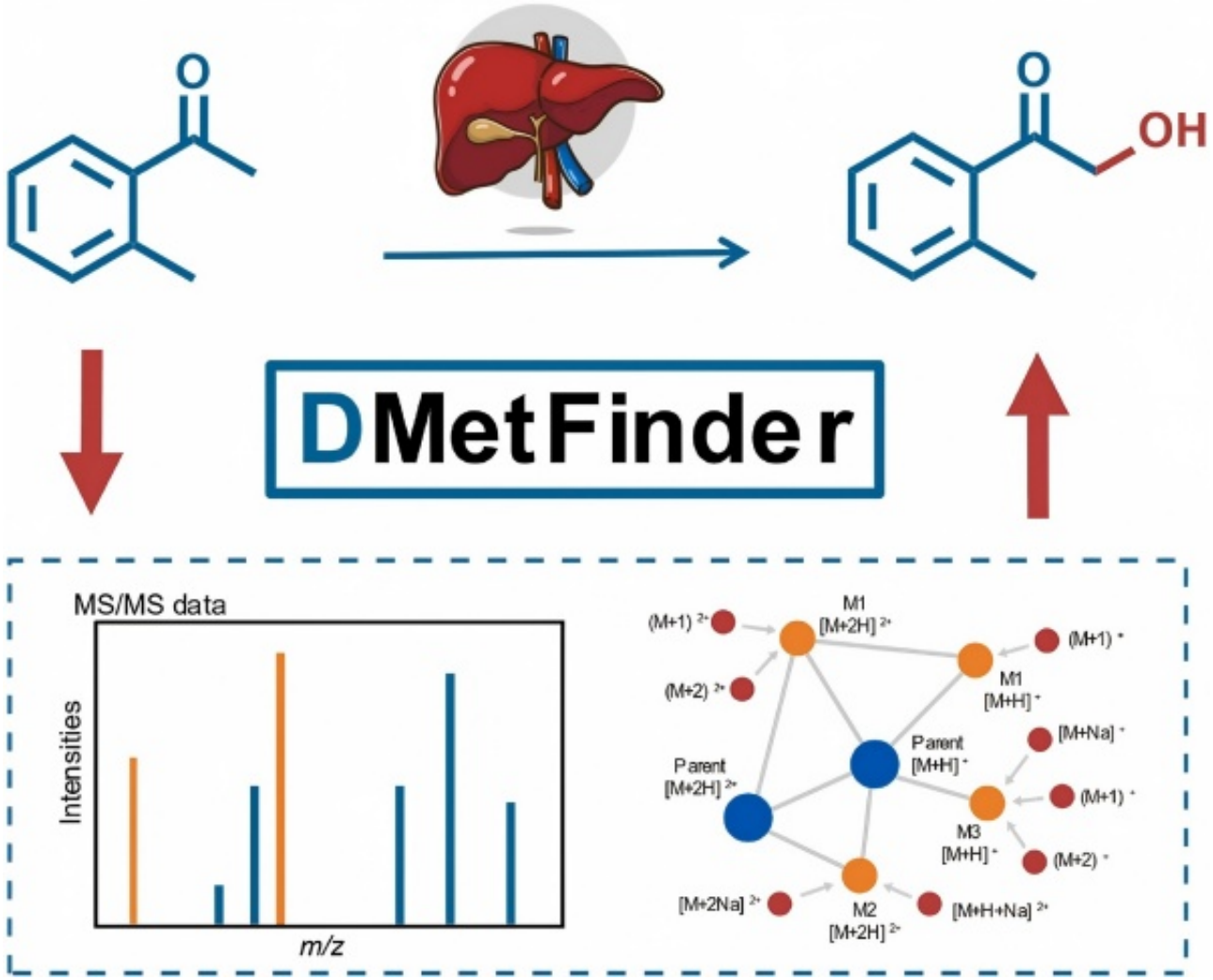
近日，中国科学院上海药物研究所与中国科学技术大学杭州高等研究院合作，发布代谢产物鉴定工具DMetFinder。

药物及先导化合物在体内外的代谢过程往往十分复杂。传统解析依赖人工经验，耗时费力，还可能遗漏低丰度或非经典代谢物。DMetFinder为这些难题提供了新的解决方案。该工具融合余弦相似度算法、同位素丰度评分和加合离子过滤等策略，实现了自动化、可视化和高可靠性的代谢物鉴定，研究人员只需输入药物结构和质谱数据，即可快速得到分析结果。作为一款离线运行的软件，DMetFinder支持药物化学家在不披露化合物结构的前提下独立完成数据解析，使用过程更加安全便捷。

DMetFinder在传统小分子药物和PROTAC等复杂大分子药物的代谢物检测中均表现出优势，尤其在识别传统工具易遗漏的大分子片段损失代谢物时，展现出更高的可靠性，为药物代谢学研究和新药发现阶段的成药性评价提供了支撑。

相关研究成果发表在*Talanta*上。

论文链接



科研人员发布新型代谢产物鉴定工具

研究团队单位：上海药物研究所

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