
深圳先进院发现GPCR药物全新结合模式

作者：writer 来源：中国科学院

本文原地址：<https://www.iikx.com/news/progress/8128.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！

日前，中国科学院深圳先进技术研究院医药所计算机辅助药物设计中心袁曙光课题组带领团队与上海科技大学合作，通过计算药学与生物化学相结合的方法，发现G蛋白偶联受体蛋白（GPCR）全新药物分子结合模式与激活机制。相关工作近期发表在ACS Central Science上。

GPCR参与着人类体内包括细胞分化、神经信号传递、代谢等多种生理功能，同时也与癌症、抑郁症、疼痛、艾滋病、糖尿病等重大疾病密切相关。GPCR是最主要的药物靶标，近40%的上市药物都针对GPCR而开发。因此，理解GPCR的分子机理成为当代药物研发中的核心课题之一。

传统上人们认为GPCR受“别构位点(allosteric site)”金属离子调控，使得GPCR处于非激活状态。在本项研究中，科研人员通过计算药学的方法，首次发现GPCR的药物分子可以通过金属离子在“正构位点(orthosteric site)”同时与药物分子和GPCR结合。计算结果得到晶体结构、生化实验以及有机合成的多方面验证。此外，通过增强该特殊结合模式的相互作用，科研人员使得改造后的药物分子活性比原来提高了16倍。

本工作同时为设计“first-in-class”新药分子提供了理论基础。

[论文链接](#)

研究团队单位：深圳先进技术研究院

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