



相同栏目

- 1 探秘亚洲最大
- 2 微生物所王琳
- 3 “中国生物多
- 4 微生物所吴迪
- 5 微生物所与北
- 6 微生物所张杰
- 7 广州生物院捷
- 8 武汉国家生物
- 9 广州生物院在
- 10 微生物所姜

热门资源

- 1 WHO警示 “
- 2 Nature Gen
- 3 美首次批准R
- 4 武汉文献情报
- 5 应对超级细菌
- 6 Nature: 科
- 7 世界首个3D
- 8 美DARPA为
- 9 澳大利亚抗生
- 10 武汉文献情报

上海药物所开发基于配体的抗新冠肺炎药物靶标预测和虚拟筛选平台

编译者: hujm 发布时间: 2021-1-26 点击量: 144 来源栏目: 成员单位动态

2003年的非典(SARS)、2012年的中东呼吸综合征(MERS)和2019年的新冠肺炎(COVID-19)均是由冠状病毒引起的。截至目前,尽管新冠病毒特效药仍未浮出水面,但有众多化合物已被报道具有抗冠状病毒活性,其中包括一些天然产物,但是它们中有很多靶标未明并且活性机制未知。

中国科学院上海药物研究所徐志建、朱维良团队早前开发了基于受体的抗新冠肺炎靶标预测和虚拟筛选方法D3Docking。作为D3Docking的补充,此团队近期开发了一种基于配体的方法D3Similarity(图1)。该项工作于2021年1月18日在线发表于Briefings in Bioinformatics杂志。

研究人员通过文献调研将抗冠状病毒活性化合物的结构、靶标、活性和病毒类型等信息一一收集起来,构建了抗冠状病毒活性化合物后台数据库CoViLigands(<https://www.d3pharma.com/D3Targets-2019-nCoV/CoViLigands/2019-nCoV.php>),以该数据库为基础,基于分子结构的二维和三维相似性比较,进行抗新冠肺炎药物靶标预测和虚拟筛选。

在获得的抗冠状病毒活性化合物相关信息和优化的三维结构的基础上,科研人员开发了基于配体的抗新冠肺炎药物靶标预测和虚拟筛选网络应用平台? D3Similarity。对于靶标预测,数据库中所有有确切靶标报道的化合物被用于构建靶标预测数据库。用户上传的分子会与靶标预测数据库中的所有抗冠状病毒活性化合物进行二维和三维相似性比较,然后根据打分排名预测潜在的靶标(图2)。对于虚拟筛选,用户可以上传拟进行虚拟筛选的化合物库并选择靶标,通过对CoViLigands对应活性化合物的二维和三维相似性比较,可以找到有潜在活性的化合物(图3)。基于此,D3Similarity可帮助药物化学家、药理学家和临床医生等发现和开发针对新冠肺炎的活性化合物,并可探索活性化合物的作用机制。

该平台具有多方面的功能应用场景,如:(1)靶标未知但临床上有活性的化合物的靶标快速预测,5-10分钟即可完成一个化合物的靶标预测;(2)针对特定靶标的虚拟筛选用于发现先导化合物;(3)多靶标药物的靶标预测;(4)用户可以从网站上快速查询抗冠状病毒活性化合物的相关信息,并提供全库下载功能,方便进一步的研究。

D3Similarity网站地址: <http://www.d3pharma.com/D3Targets-2019-nCoV/D3Similarity/index.php>

原文题目 上海药物所开发基于配体的抗新冠肺炎药物靶标预测和虚拟筛选平台

文章来源 http://www.simm.ac.cn/web/xwzx/kydt/202101/t20210126_5877515.html, <https://doi.org/10.1093/bib/bbaa422>

上一篇: [武汉病毒所/生物安全大科学中心在迷你...](#)

下一篇: [微生物所在冰川低温细菌研究领域取得...](#)

提供服务: 导出本资源