

生成式人工智慧小分子藥物探索平臺

本院覽號

33T-1140327

公告日期

2025-04-23

智財權狀態

著作權

摘要

傳統電腦輔助藥物設計面臨藥物資料庫受限、篩選速度瓶頸、分子嵌合準確度不足及結果後處理等挑戰。雖有研究分別解決這些問題，卻少有整合性方案。本工作流程首先建立符合實際可合成條件並避免毒性結構的分子資料庫，接著透過優化後的嵌合軟體進行快速虛擬篩選，並依嵌合分數與分子骨幹分類，以獲取具結構新穎性的候選分子。隨後，以網頁視覺化展示分子-受體系統的物化性質與結合相位，輔助使用者進行篩選。最後，透過分子動力學模擬加以以合適的能量計算與參數設定，以定量及定性的方法評估分子結合穩定度。此平臺不僅可提供新穎的潛在候選藥物分子，也可縮短電腦模擬和實驗結果的差距，以加速新藥的探索。

創作人

林榮信

技術優勢

- 自行開發生成式人工智慧（Generative AI）計算程式系統。
- 用於評估蛋白質與小分子化合物的結合能力分析模式。
- 在蛋白質空間所蒐尋的小分子化合物達到 10^{13} 個數的小分子化合物。
- 可確認小分子化合物的合成可能性。

應用範圍

生成式人工智慧新藥開發。



中央研究院
ACADEMIA SINICA