耀淼生物

推动AI技术在生物科研领域的创新应用

配体⇋ 受体蛋白高通量互作虚拟筛选

1 数据准备

构建整理配体分子化合物库，根据受体蛋白的序列准确建模

2 AutoDock-Vina初步对接筛选

对所有候选分子进行大批量初步对接，筛选出得分最高的 5%的分子进入下一轮。

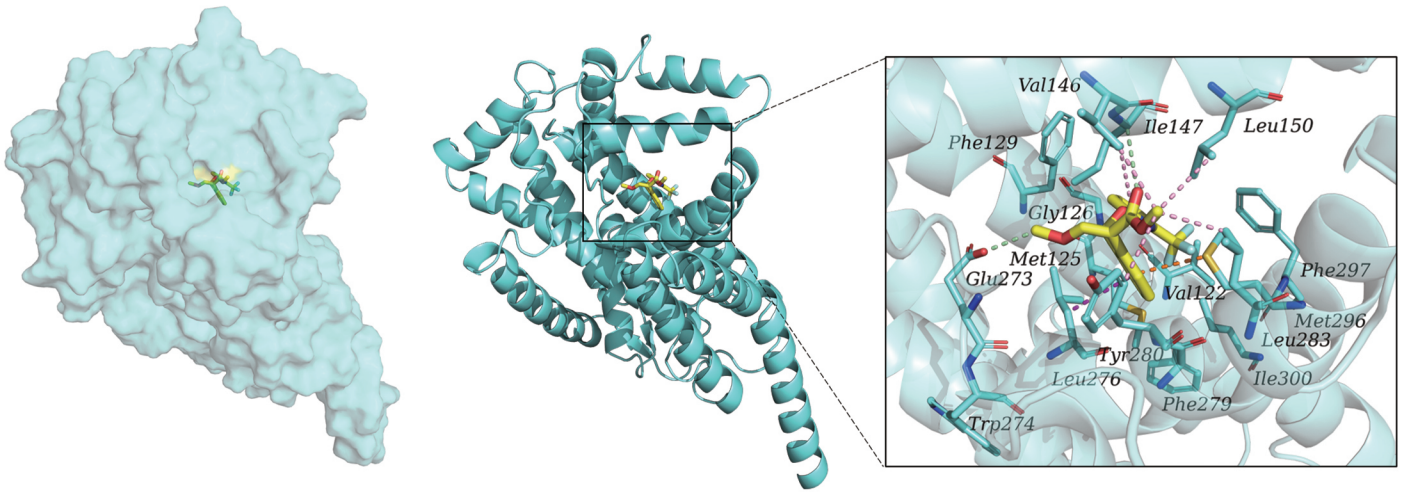
3 标准精确筛选（SP）

调整对接参数，再次评价初步筛选后的候选分子，再次筛选出得分最高的 5%进入最终评估。

4 极限精确筛选（XP）

调高对接参数，严格评价两轮筛选后的候选分子，结合能得分前 5%的候选分子，即为互作的配体分子。

NeuralPlex 2精细化对接，深入分析最优分子的结合模式，可视化展示结合位点



参考文献:

[1] Abramson, J., Adler, J., Dunger, J., et al. (2024). Accurate structure prediction of biomolecular interactions with AlphaFold 3. Nature, 630, 493–500.DOI: 10.1038/s41586-024-07487-w

[2] Trott, O., & Olson, A. J. (2010). AutoDock Vina: improving the speed and accuracy of docking with a new scoring function, efficient optimization, and multithreading. Journal of Computational Chemistry, 31(2), 455-461.DOI: 10.1002/jcc.21334

[3] Seeliger, D., & de Groot, B. L. (2010). Ligand docking and binding site analysis with PyMOL and AutoDock/Vina. Journal of Computer-Aided Molecular Design, 24(5), 417-422.10.1007/s10822-010-9352-6

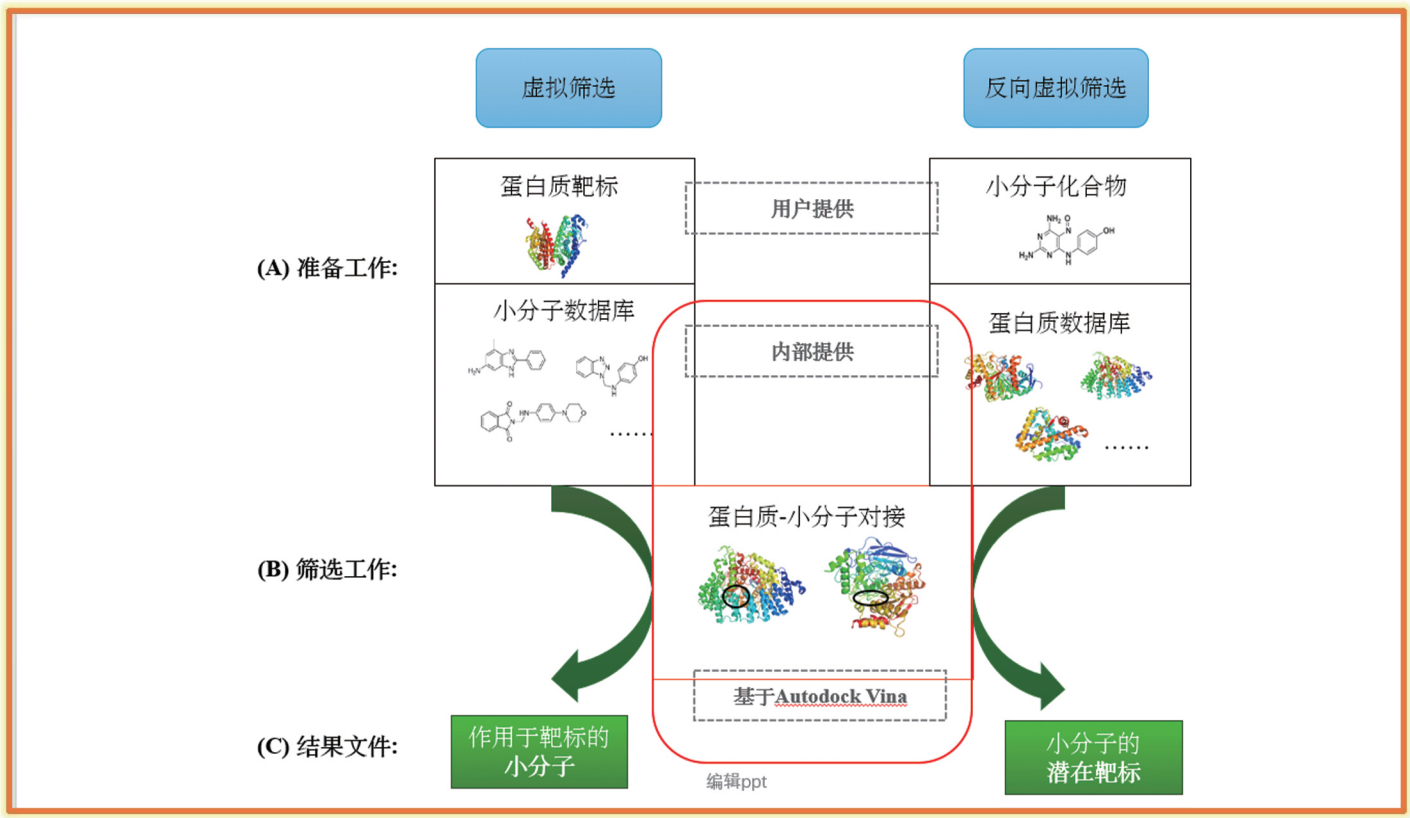
[4] O'Boyle, N. M., Banck, M., James, C. A., Morley, C., Vandermeersch, T., & Hutchison, G. R. (2011). Open Babel: An open chemical toolbox. Journal of Cheminformatics, 3(1), 33.DOI: 10.1186/1758-2946-3-33

[5] Jumper, J et al. Highly accurate protein structure prediction with AlphaFold. Nature (2021).

耀淼生物

推动AI技术在生物科研领域的创新应用

以药找靶 or 以靶找药



抑制剂相关（Inhibitor Library）	激酶抑制剂库	2014
	细胞因子抑制剂库	632
	高选择性抑制剂库	590
	抑制剂库	4941
	蛋白酶抑制剂库	454
	蛋白-蛋白互作（PPI)抑制剂库	407
	酪氨酸激酶抑制剂分子库	654

代谢相关（Metabolism related Library）	人内源代谢化合物库	847
	糖代谢化合物库	592
	谷氨酰胺代谢化合物库	483
	糖酵解化合物库	430
	肠道微生物化合物库	146
	脂代谢化合物库	544
	代谢化合物库	3239
	小鼠代谢化合物库	158
	线粒体靶向化合物库	719

合肥耀淼生物科技有限公司

邮箱：yaomiao@ymbiotech.com

电话：18225909162

网址：www.ymbiotech.com

扫一扫