

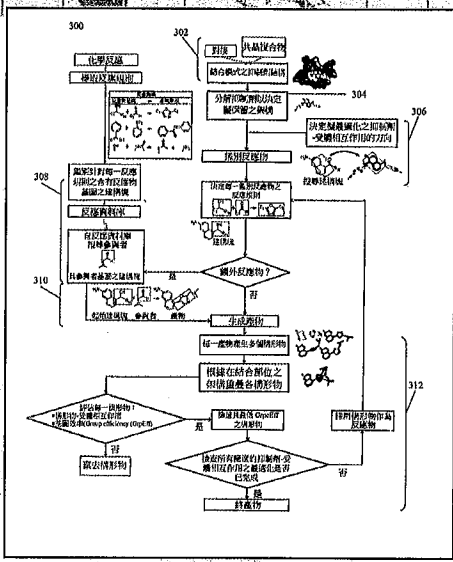


為先導藥物最適化之以結構為基礎的片段遷越及合成可行性之改良

發明人：曾宇鳳 教授
 單位：國立臺灣大學生醫電子與資訊學研究所
 簡歷：<https://www.cmdm.tw/janetseng.html>

市場及需求：
 系統可用於輔助新藥開發團隊進行電腦輔助設計化學結構與後續性質分析。

技術摘要：
 本發明開發一種電腦輔助的藥物設計方法和系統，經由合成無障礙之基於結構的藥物設計以最適化先導化合物。在本發明中，開發和實施基於結構的先導化合物最適化之系統：LeadOp+R(為"基於結構之先導化合物最適化的合成無障礙之化學反應路線"之簡稱)-一種演算法，進行合成無障礙之先導化合物最適化。LeadOp+R 提供篩選擬組裝之新的片段之優點，其係基於計算在活性部位之基團效率及反應規則而進行鑑別。



優勢：
 在大多數應用電腦輔助藥物設計的基本困難是設計(建議)的分子往往是具不確定的合成可接受性，導致實驗合成與模型設計間的緩慢反饋改善循環。產生自合成容易度的分子，可能抑制劑的所需要的核心無法很容易地保存下來。因此，需要改進的系統和方法，以最適化具有更高的準確性的先導化合物。

競爭產品：
 WODCA, SYNGEN 及 ROBIA

專利簡述：
 中華民國專利申請號：中華民國發明第 I611053 號專利。

聯絡方式：臺大產學合作總中心