

FBDD 案例展示

结合我们在化学信息学、化合物库合成和使用 SPR 方面的专业知识，我们率先使用非速率筛选 (ORS) 来进行化合物的动态优化，从而能够筛选未纯化的反应产物。该技术应用于从分子片段中快速产生先导化合物，而无需纯化化合物库或使用蛋白质结构 (Murray, J. B. et al., J. Med. Chem. 2014).

结合来自广泛配体点击的结构、热力学和动力学信息，我们设计出新型和高活性的药物样分子。我们的成功包括抑制蛋白质-蛋白质相互作用、ATP 酶和激酶的先导化合物，产生 Mcl-1、Bcl-2、Hsp90 和 Chk1 的临床候选化合物。我们的新技术和方法的公开例子包括使用我们的 ORS 技术来鉴定 PDHK 的新颖抑制剂，以及使用我们在蛋白质工程、表达和结晶学方面的专业知识来产生 Chk1 衍生的 LRRK2 替代化合物。