

γ -氨基丁酸 (Gaba) 受体介导麻醉的蛋白质组学研究

Thursday, 27 November 2025 09:50 (15 minutes)

麻醉剂在外科手术和治疗干预中至关重要，但它们具有副作用和不同程度的有效性，因此需要提供更精确和可控效果的新型麻醉剂。针对中枢神经系统中的主要抑制性受体—— γ 氨基丁酸 (GABA) 受体，可以增强其抑制作用，从而可能减少副作用，同时提高麻醉药的效力。在这项研究中，我们考虑了蛋白质-蛋白质相互作用 (PPI) 网络中的 4000 多种蛋白质和超过 150 万种已知的结合化合物，介绍了基于 24 种 GABA 受体亚型的 GABA 受体介导的麻醉的蛋白质组学学习。我们开发了相应的药物-靶标相互作用网络，以确定新型麻醉剂设计的潜在先导化合物。为了确保稳健的蛋白质组学学习预测，我们整理了一个数据集，其中包含 PPI 网络内 980 个目标池中的 136 个目标。我们采用了三种机器学习算法，集成了先进的自然语言处理 (NLP) 模型，例如预训练的变压器和自动编码器嵌入。通过全面的筛选过程，我们评估了超过 180,000 种针对 GABRA5 受体的候选药物的副作用和再利用潜力。此外，我们还评估了这些候选药物的 ADMET (吸收、分布、代谢、排泄和毒性) 特性，以确定那些具有接近最佳特性的候选药物。这种方法还涉及优化现有麻醉剂的结构。我们的工作提出了一种创新策略，用于开发新麻醉药物、优化麻醉剂使用以及更深入地了解潜在的麻醉相关副作用。

Primary authors: Prof. 江, 健 (武汉纺织大学); Dr 陈, 龙; Dr 朱, 月英 (武汉纺织大学); Dr 时, 亚洲 (武汉纺织大学); Prof. 仇, 华海 (武汉纺织大学); Prof. 张, 本龚 (武汉纺织大学); Prof. 周, 天寿 (中山大学); Prof. 魏, 国卫 (密歇根州立大学)

Presenter: Dr 陈, 龙

Session Classification: Thursday Morning First Session