

附件 1

项目名称	药物关键活性成分辨识及新适应症拓展的多维度创新体系构建与应用
项目完成单位	西南医科大学附属医院、西南医科大学、西安正大制药有限公司、四川科瑞德制药股份有限公司、成都地奥制药集团有限公司、武汉联合药业有限责任公司
项目完成人	吴建明、王龙、高蝶、罗杰斯、吴安国、周晓钢、曾静、梅其炳、罗京、陈爽、董明芝、陈刚、秦大莲、余录、陈琪
项目简介	<p>药物关键活性成分是承载药物安全、有效、稳定、可控基本属性的核心，也是拓展药物新适应症与新用途的关键，更是中（成）药现代研究与系统开发的痛点与挑战。为解决临床对高质量药物需求的行业痛点，课题组通过多学科交叉创新，以临床应用反馈为指导，围绕药物关键活性成分辨识及新适应症拓展的技术体系，创新性提出“临床应用反馈-人工智能药物活性虚拟筛选-药理学活性验证与评价-活性成分定向分离与分析”的药物关键活性成分辨识体系，构建了：①基于人工智能（AI）的药物作用靶点预测和潜在活性成分筛选的新技术；②基于特定疾病的体内外多维疾病模型构建与应用新技术；③靶点垂钓模式筛选药物关键活性成分新技术；④多配体-多靶点相互作用毛细管电泳质谱新技术；⑤药物活性成分“定向萃取”新技术。课题组也已经运用上述搭建的体系开展了生血宁、地榆升白片、平消胶囊、律康等药物的系统性研究与新适应症拓展，累计发表文章110篇，包括高水平论文（STTT等）在内的中科院1区SCI文章17篇，单篇最高影响因子38.12，影响因子大于10分13篇，高被引论文3篇。中文权威期刊《中草药》《中国中药杂志》在内的核心期刊13篇，单篇最高下载次数为1446次。授权发明专利13项，累计经济产值58592万元，利润增长15995万元。上述技术体系的构建和应用示范为其他药物的关键活性成分辨识及新适应症拓展提供了理论和技术支撑，为医药高质量发展提供了重要参考。</p>



2023年 4月 20日