

Studie v magazínu Nature odhalila: Přípravek BGM0504, navržený za podpory umělé inteligence a molekulární dynamiky, vykazuje zvýšenou účinnost

23.7.2024 - Cecilia Huová | PROTEXT

Článek s názvem "Molecular Dynamics Guided Optimization of BGM0504 Enhances Dual Target Agonism for Combating Diabetes and Obesity" představuje výsledky vývoje přípravku BGM0504.

BGM0504, duální agonista receptorů pro GIP a GLP-1, navržený s podporou umělé inteligence, vykazuje vynikající účinnost v experimentech in vitro i in vivo. Společnost Bright Gene pomocí počítačových simulací řízených umělou inteligencí zjistila, že optimální interakce mezi glutamátovými zbytky na GLP-1R i GIPR a zbytkem K20 peptidového agonisty zajišťuje zlepšenou aktivitu. Tato interakce je klíčovým poznatkem, který nebyl z kryo-EM studií patrný. Přípravek BGM0504 byl navržen tak, aby zachoval volnost aminoskupiny zbytku K20. Toho docílí posunutím bodu acylace do polohy 40 přípravku BGM0504. Tento návrh vedl k trojnásobnému zvýšení agonistických účinků na GLP-1R a GIPR s lepšími terapeutickými výsledky u modelů, které používají diabetické a obezní myši.

O společnosti Bright Gene a přípravku BGM0504

Bright Gene (burzovní kód: 688166.SH) je inovativní farmaceutická společnost zaměřená na vývoj těch nejlepších léčiv ve své třídě. Společnost za účelem uspokojení globálních klinických potřeb integruje API a receptury a kombinuje generické a inovativní léky. Přípravek BGM0504 je duální agonista receptorů GIP/GLP-1 pro léčbu diabetu 2. typu, obezity a NASH, který je v současné době ve finálním stádiu 2. fáze klinických studií.

Odkazy

Yuan, J., Liu, W., Jiang, X. et al. Molecular dynamics-guided optimization of BGM0504 enhances dual-target agonism for combating diabetes and obesity. *Sci Rep* 14, 16680 (2024).
<https://doi.org/10.1038/s41598-024-66998-8>

<http://www.ceskenoviny.cz/tiskove/zpravy/studie-v-magazinu-nature-odhalila-pripravek-bgm0504-navrzeny-za-podpory-umele-inteligence-a-molekularni-dynamiky-vykazuje-zvysenou-ucinnost/2546493>