

(A brief summary in Chinese)

潜在的高效抗新型冠状病毒药

运用分子生物学, 结构生物学, 药物设计原理, 扑拓学, 大数据, 以及深度学习, 从联邦食品及药物管理局已经批准的1465种药物中筛选出了以下潜在的高效抗新冠病毒药 (按照预测的药物与病毒剪切酶的结合能, i.e., predicted drug-2019-nCoV 3CL protease binding affinity, 由强到弱排列):

1. Bortezomib 万珂, 在台湾的正式商品名为萬科 (原用途: 延缓、停止及治疗多发性骨髓瘤和被套细胞淋巴瘤恶化的情况, 属于标靶治疗的新型抗癌药. 潜在抗新冠病毒效果极强. 预测结合能: -12.2 kcal/mol; IC50: 1.2 nM)
2. Flurazepam 盐酸氟西泮 (原用途: 抗焦虑药、镇痉剂、镇静剂及肌肉松弛剂. 预测结合能: -10.4 kcal/mol; IC50: 24.2 nM)
3. Ponatinib 普纳替尼 (原用途: 白血病治疗药物. 预测结合能: -10.3 kcal/mol; IC50: 30.4 nM)
4. Sorafenib 蕾莎瓦 (原用途: 治疗肾细胞癌及肝癌. 预测结合能: -10.0 kcal/mol; IC50: 45.3nM)
5. Dasatinib 达沙替尼 (原用途: 慢性粒细胞性白血病, 费城染色体呈阳性的急性髓性白血病该药, 前列腺癌等. 预测结合能: -9.9 kcal/mol; IC50: 57.6 nM)
6. Paramethasone 帕拉米松 (原用途: 严重的细菌感染和严重的过敏性疾病、各种各种血小板减少性紫癜、粒细胞减少症、严重皮肤病、器官移植的免疫排斥反应、肿瘤的治疗及对糖皮质激素敏感的眼部炎症等. 预测结合能: -9.7 kcal/mol; IC50: 76.0 nM)
7. Clocortolone 氯可托龙 (原用途: 各种皮肤病, 例如, 湿疹, 皮炎, 过敏, 皮疹. 预测结合能: -9.6 kcal/mol; IC50: 94.1 nM)
8. Flucloxacillin 氟氯西林 (原用途: 半合成的耐青霉素酶的青霉素. 预测结合能: -9.6 kcal/mol; 95.5nM)
9. Sertindole 舍吲哚 (原用途: 非典型抗精神病药物. 预测结合能: -9.5 kcal/mol; IC50: 100 nM)
10. Clevidipine 氯维地平 (原用途: 治疗高血压. 预测结合能: -9.5 kcal/mol: 103 nM)
11. Aprepitant 阿瑞吡坦胶囊 (原用途: 止吐. 预测结合能: -9.5 kcal/mol; IC50: 109 nM)
12. Atorvastatin 立普妥 (原用途: 降低血液胆固醇水平的常见药物. 预测结合能: -9.5 kcal/mol; IC50: 109 nM)

13. Cinolazepam 西诺西洋 (原用途: 抗焦虑镇静催眠药. 预测结合能: -9.5 kcal/mol; IC50: 113 nM)

14. Clofazimine 氯法齐 (原用途: 治疗结核病 (TB)、麻风病和其它相关传染病的抗生素. 预测结合能: -9.4 kcal/mol; IC50: 120 nM)

15. Fosaprepitant 福沙匹坦 (原用途: 一种肿瘤辅助用药. 预测结合能: -9.4 kcal/mol; IC50: 130 nM)

另外, 联邦食品及药物管理局已经批准的抗病毒剪切酶的药物中, 分析表明唯有 Boceprevir 博赛泼维 (原用途: 丙型肝炎蛋白酶抑制剂) 可能有一定的效果 (排名18. 预测结合能: -9.3 kcal/mol; IC50: 146 nM). 顺便提一下, 以前传的抗艾滋病药, 洛匹那韦/利托那韦片 (Lopinavir/ Ritonavir), 排名很靠后 (预测结合能: -7.1/-7.2 kcal/mol; IC50: 5978/5362 nM). 达芦那韦 (Darunavir) 排名也很靠后 (预测结合能: -7.1 kcal/mol; IC50: 6795 nM).

参考文献:

Duc Nguyen, Kaifu Gao, Jiahui Chen, Rui Wang and Guo-Wei Wei. Potentially highly potent drugs for 2019-nCoV, 2020. <https://doi.org/10.1101/2020.02.05.936013>
<https://users.math.msu.edu/users/wei/paper/p248.pdf>