



硅康医药宣布确定首个开放科学奖学金获得者

美国马萨诸塞州波士顿，2017 年 5 月 26 日：硅康医药 (Silicon Therapeutics) 是一家集成计算医药研发公司，专门研发新型小分子以针对此前难以靶向的靶点。今日，硅康医药宣布其第一个开放科学奖学金 (Open Science Fellowship) 将授予美国纽约纪念史隆-凯特琳癌症中心 (Memorial Sloan Kettering Cancer Center) 的约翰·乔戴拉博士 (Dr. John D. Chodera) 实验室。该奖学金的设立旨在推动医药研发领域的开放科学运动，为科学知识、方法与数据的获得提供便利。该项目名为“高效、开源、基于自由能的前导物优化算法开发”(Development of efficient open source free energy-based lead optimization algorithms)，将由乔戴拉实验室 (Chodera Lab) 的研发生帕特里克·格里纳韦 (Patrick Grinaway) 领导开发。该项目将以采用 GPU 加速的开源 OpenMM 分子模拟平台为基础，研发先进的方法来计算相对结合自由能，这些方法能够用于预测结合亲和力及配体与靶点结合时的选择性。

“在硅康医药，开放科学是我们文化的重要组成部分。我们致力于支持具有广泛潜在效用的分子模拟技术等领域的研究传播，而此项开放科学奖学金的设立正是我们决心的体现。”硅康医药的首席科学官伍迪·谢尔曼博士 (Dr. Woody Sherman) 说道，“我们很荣幸地通过该奖学金来支持这位非常有才华的研究生和乔戴拉实验室。乔戴拉实验室对开放科学运动起到巨大支持作用，而且是分子模拟领域公认的领袖，特别是在自由能计算方面。通过该奖学金所带来的紧密合作，我们将在 OpenMM 平台内进行相对结合自由能计算，从而高效预测精准的蛋白质-配体结合亲和力。此外，我们将满怀欣喜地实施一项由乔戴拉实验室创立的新方法，在一次计算中同步模拟大量配体，从而显著地扩展在药物研发项目中所能够探索的化学空间。”

这一专项奖学金的设立将用于研究自由能微扰计算方法 (Alchemical Free Energy Calculations，一种基于物理的模拟方法)，该方法通过将原始分子在计算机中转变为新分子的微扰，能够用于预测结合亲和力 (及其他一些物理性能)。该项目将会对几十年来的学术研究产生重大影响，并将相对结合自由能计算引入 Omnia 联盟的研究之中。研究建立在 [OpenMM](#) 平台之上，该平台是现代分子建模与模拟领域的开源生态系统。“我们的实验室致力于通过打造高质量开源工具来探索药物研发的下一代科技。这些工具可以对前景广阔的新算法进行迅速勘探及评估。硅康医药将全力支持医药研发领域高质量开源科学的发展，对此我们十分激动。”

硅康医药介绍

硅康医药是第一家完全集成计算医药研发公司，专注于新药研发，通过当前被传统方法视为困难的靶点为疾病治疗提供新途径。我们的 INSITE 平台使用精准的全原子模拟，能够详尽地表现靶点的真正动态性质，基于此，我们能够发现、设计并优化此前被视作“无法合成的”靶点化合物。我们的科学、我们的团队、我们的使命聚集于利用我们先进的计算技术来加速药物研发过程，从而为病患提供更多可选择的创新药物。硅康医药总部位于美国马萨诸塞州波士顿，在中国上海设有办公室。