CUỘC THI SÁNG TẠO TẾ BÀO GỐC 2026
LẦN THỨ 11 | CHỦ ĐỀ: TẾ BÀO GỐC & AI
MĐT: 325
UT CURTIS
ĐƠN VỊ TỔ CHỨC
ĐƠN VỊ TÀI TRỢ

ỨNG DỤNG TRÍ TUỆ NHÂN TẠO TRONG ĐÁNH GIÁ CHIẾN LƯỢC LỰA CHỌN MARKER, LINKER VÀ DỰ ĐOÁN ADMET PEDERIN TRONG ĐỊNH HƯỚNG PHÁT TRIỂN ADC NHẮM ĐÍCH TẾ BÀO GỐC UNG THƯ VÚ.

APPLICATION OF ARTIFICIAL INTELLIGENCE IN EVALUATING STRATEGIES FOR SELECTING MARKERS, LINKERS, AND IN PREDICTING ADMET PROPERTIES OF PEDERIN IN ORDER TO GUIDE THE DEVELOPMENT OF ANTIBODY-DRUG CONJUGATES (ADCS) TARGETING BREAST CANCER STEM CELLS.

1 TỔNG QUAN ĐỀ TÀI

Ung thư vú: một trong những nguyên nhân gây tử vong hàng đầu và trở thành thách thức lớn đối với y học do độc tính và tình trạng kháng thuốc của các liệu pháp truyền thống.

Kháng thể liên hợp thuốc (antibody–drug conjugates, ADCs) là chiến lược điều trị tiềm năng, kết hợp khả năng nhận diện tế bào đích của kháng thể với hoạt tính gây độc tế bào của payload thông qua linker.

Pederin: hoạt chất được tổng hợp bởi vi khuẩn cộng sinh trong kiến ba khoang (*Paederus fuscipes*) có hoạt tính ức chế tế bào mạnh, bị hạn chế ứng dụng do độc tính cao.

2 MỤC TIÊU TỔNG QUÁT

Nghiên cứu dự kiến tập trung vào việc tổng hợp và đánh giá bằng chứng về **BCSCs** cùng các **dấu ấn bề mặt (marker)** tiềm năng và phân tích chiến lược tiền thuốc Pederin và các đặc tính liên quan đến khả năng giải phóng hoạt chất.

So sánh các đặc điểm quan trọng của **linker,** đồng thời sử dụng công cụ **AI** để dự đoán các thông số **ADMET** phù hợp. Các kết quả sẽ được tích hợp theo phương pháp **phân tích đa tiêu chí** nhằm xác định những phương án có cơ sở để ưu tiên nghiên cứu tiếp theo.

3 NỘI DUNG NGHIÊN CỨU

PHÂN TÍCH VÀ TỔNG HỢP DỮ LIỆU

- Thu thập tài liệu về các đối tượng nghiên cứu (BCSCs, ADC, marker, linker...)
- Dùng AI hỗ trợ trích xuất và phân loại thông tin.
- Chuẩn hóa dữ liệu, lưu lại nguồn.

ĐÁNH GIÁ MARKER

- Đánh giá các marker từ tài liệu đã phân loại.
- Tiêu chí đánh giá dựa trên mức độ biểu hiện, độ đặc hiệu, tính đồng nhất, bằng chứng về thí nghiệm lâm sàng,...

ĐÁNH GIÁ LINKER

- Phân loại linker (phân cắt/không phân cắt).
- Tiêu chí đánh giá dựa trên độ ổn định, điều kiện hoạt hóa, khả năng hạn chế giải phóng ngoài mục tiêu, độ tương thích với pederin,...

DỰ ĐOÁN ADMIT CỦA PEDERIN

- Xác định cấu trúc hóa học của pederin.
- Dự đoán các endpoint: độ hấp thu, phân bố, chuyển hóa, thải trừ và độc tính.
- Đối chiếu với các tài liệu khác và đánh giá giới hạn áp dụng của mô hình.

TỔNG HỢP DỮ LIỆU VÀ XẾP HẠNG PHƯƠNG ÁN

- Xây dựng khung đánh giá MCDA.
- Chuẩn hóa điểm số, xác định trọng số.
- Phân tích độ nhạy.
- Đề xuất phương án hợp lý dựa trên đánh giá đa tiêu chí.

4 QUY TRÌNH NGHIÊN CỨU

Thu thập dữ liệu từ các cơ sở dữ liệu công khai
PubMed, BCSCdb, UniProt, Human Protein Atlas,...

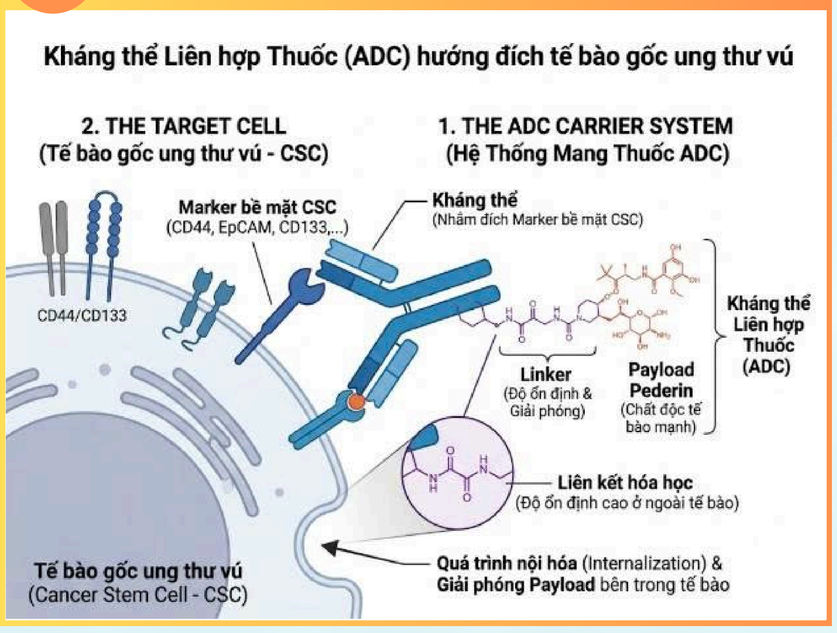
➤ **Dùng AI để phân tích và tổng hợp dữ liệu**

➤ **Đánh giá marker** | **Đánh giá linker** | **Dự đoán ADMET Pederin**

➤ **Đánh giá đa tiêu chí nhằm đề xuất cấu trúc kháng thể liên hợp thuốc**

➤ **Đề xuất phương án nghiên cứu tiếp theo, tiến hành thử nghiệm tiền lâm sàng**

5 MÔ PHỎNG CẤU TRÚC ADC



6 KẾT QUẢ DỰ KIẾN

- Bảng đánh giá, xếp hạng các kháng thể, CSC marker đặc hiệu ung thư vú tiềm năng.
- Ma trận so sánh linker dựa trên các tiêu chí: cơ chế giải phóng, độ ổn định và bằng chứng khoa học.
- Hồ sơ ADMET dự đoán độ tan, tính thấm, độc tính và phạm vi áp dụng của Pederin.
- Bảng MCDA xếp hạng phương án và phân tích độ nhạy.

7 TÀI LIỆU THAM KHẢO

- Marcucci, F., Caserta, C. A., Romeo, E., & Rumio, C. (2019). Antibody–drug conjugates (ADC) against cancer stem-like cells (CSC)–Is there still room for optimism? Frontiers in Oncology, 9, Article 167.
- Piel, J. (2002). A polyketide synthase-peptide synthetase gene cluster from an uncultured bacterial symbiont of Paederus beetles. Proceedings of the National Academy of Sciences, 99(22), 14002–14007. https://doi.org/10.1073/pnas.222481399
- Fu, L., Shi, S., Yi, J., Wang, N., He, Y., Wu, Z., Peng, J., Deng, Y., Wang, W., Wu, C., Lyu, A., Zeng, X., Zhao, W., Hou, T., & Cao, D. (2024). ADMETlab 3.0: An updated comprehensive online ADMET prediction platform enhanced with broader coverage, improved performance, API functionality and decision support. Nucleic Acids Research, 52(W1), W422–W431. https://doi.org/10.1093/nar/gkae236
- Saeg, F., & Anbalagan, M. (2018). Breast cancer stem cells and the challenges of eradication: A review of novel therapies. Stem Cell Investigation, 5, Article 39. https://doi.org/10.21037/sci.2018.10.01