

技術詞彙表

於本文件內，除非文義另有所指，否則本文件所用有關本集團及其業務的若干詞彙的解釋及釋義具有下文所載的涵義。該等詞彙及其涵義可能不符合該等詞彙的標準行業涵義或用法。

「自始」	指	從第一原則出發或基於第一原則
「ADC」	指	抗體偶聯藥物，一類新興的治療藥物，將單克隆抗體的靶向特異性與細胞毒性細胞毒劑的致命性相結合，廣泛用於癌症的管理或治療
「ADMET」	指	吸收、分佈、代謝、排洩及毒性，描述了在機體內處置藥物化合物的五個主要過程
「ADMET性質」	指	包括藥物的吸收、分佈、代謝、排洩及毒性等特性，使藥物開發人員能夠了解候選藥物的安全性及有效性，也是獲得監管批准的必要條件
「親和力」	指	在任何給定的藥物濃度下藥物與受體結合的程度或分數或藥物與受體結合的牢固性。親和力描述兩種化學物質或抗原與抗體相互作用的強度
「自動引導車」	指	自動引導車，能夠在物流或生產工廠環境中運輸包裹、材料及／或產品的自動定製車輛
「人工智能」	指	人工智能，使用機器（尤其是計算機系統）模擬人類的智能程序
「算法」	指	清晰指令的有限序列，通常用於解決某類特定問題或進行計算

技術詞彙表

「抗體」	指	亦稱為免疫球蛋白，是免疫系統對外來入侵顆粒（抗原，如細菌及病毒）做出反應而產生的一種保護性Y形蛋白
「測定」	指	實驗室醫學及分子生物學的調查或分析程序，用於定性評估或定量測量目標實體（被分析物）的存在、數量或功能活性
「原料藥」	指	活性藥物成分，在疾病的診斷、治療、症狀緩解、處理或預防中有藥理活性或其他直接作用或能影響人體結構或功能的藥品成分
「B細胞」	指	B淋巴細胞，一種產生抗體的白細胞
「結合自由能」	指	結合態與完全非結合態之間的自由能差
「結合位點」	指	藥物發現的關鍵要素之一，為藥理學靶點中的熱點，設計的類藥物分子應與之相結合
「CAGR」	指	複合年增長率
「催化劑」	指	一種提高化學反應速率的物質，其本身不會發生任何永久性的化學變化
「自動催化劑研發」	指	發現及開發具有先進性能的新型催化劑的自動研發活動
「CDMO」	指	合同開發和製造組織
「cGMP」	指	FDA推行的現行生產質量管理規範
「ChatGPT」	指	聊天生成預訓練轉換器，為OpenAI開發的一款人工智能聊天機器人，它使用自然語言處理技術創建仿人對話

技術詞彙表

「化學空間」	指	化學信息學中的一個概念，即符合給定結構原理及邊界條件的全部可能分子及化合物涵蓋的屬性空間，其中包含數百萬可供研究人員隨時查閱及使用的化合物。化學空間建議以地理圖的形式說明分子及其特性的分佈
「化學合成」	指	進行一個或多個化學反應，旨在將反應物或初始物質轉化為一個或多個產物的過程
「臨床試驗／研究」	指	用於發現或驗證測試藥物的治療及預防效果及副作用以確定此類藥物的安全性與有效性的研究
「雲」	指	支持雲計算的計算機及連接
「雲計算」	指	將計算機數據及程序存儲在可通過互聯網訪問的多個服務器上的做法
「CMC」	指	化學、製造及控制
「CMO」	指	合約製造組織
「合作者」	指	與藥物發現合作項目有關的藥物開發商客戶
「合作者－被投資方」	指	我們向其提供解決方案以換取其股權的合作者，或我們對其進行股權投資的被投資方，我們認為彼等擁有潛在的同類首創或同類最佳管線或尖端技術
「化合物」	指	由兩種或多種成分結合而成的物質
「構象」	指	分子中原子的任何空間排列，可通過圍繞理論上的單鍵旋轉而相互轉化

技術詞彙表

「構象約束」	指	向先導候選化合物引入一些特定結構約束，減少可能的構象總數，有利於採用具生物活性的構象，進而有利於目標受體的分子識別，可用以提高候選分子的效力及／或選擇性
「抗衡離子」	指	帶有與其相關物質相反電荷的離子，可影響配位聚合物結晶，導致不同的配位結構
「CRO」	指	合約研究機構，一類以合約外包研究服務的形式為製藥、生物技術及醫療器械行業提供支持的公司
「cryo-EM」	指	冷凍電鏡，一種對冷卻至低溫的樣品進行結構測定的冷凍顯微鏡技術，可揭示膜蛋白、離子通道、酶及激素受體等生物藥物靶點的高分辨率結構，對揭示病毒結合位點的結構至關重要
「晶體形態」	指	為許多工業流程中的關鍵要素，對藥品、農用化學品、石化產品及水泥的加工及後加工階段產生巨大影響
「客戶留存率」	指	上一期間我們的現有客戶在本期仍為我們客戶的百分比
「晶體結構預測」	指	根據指定分子的分子結構確定由其形成的準確晶體結構的能力
「數據湖」	指	用於存儲、處理及獲得大量結構化、半結構化及非結構化數據的集中式數據庫，能夠以其原生格式存儲數據並處理任何類型的數據，而不受大小限制

技術詞彙表

「從頭」	指	自開始
「數字孿生」	指	物理對象、人士或過程的數字表示，在其環境的數字版本中情景化
「二鹽酸鹽」	指	包含與相同化學種結合的兩分子鹽酸組分的化合物
「乾實驗室」	指	進行計算機模擬或數據分析(尤其是通過計算機進行)的實驗室
「動態集群」	指	一個服務器集群，其基於從其集群成員收集的工作負載要求及性能信息使用權重及工作負載管理來動態並自動均衡其集群成員的工作負載，尤其適用於可能有可變資源需求的機器學習工作負載
「電化學發光」	指	電化學發光，於電極生成的物種經歷電子轉移反應形成激發態並發光的過程
「功效」	指	給定干預(疫苗及藥物)產生的有益變化
「快速跟進」	指	合成現有藥物的類似物，以期獲得較初始藥物具有更好特性的化合物
「自由能微擾」	指	自由能微擾，預測候選分子與其生物靶點之間結合強度的方式
「第一性原理」	指	理論、體系或方法所依據的基本概念或假設
「第一性原理計算」	指	一種基於量子力學原理，利用基本物理量(如電子的質量、電荷及靜電力)直接計算物理特性的方法

技術詞彙表

「力場」	指	一系列方程及相關常數，旨在再現經測定結構的分子幾何形狀及特定屬性
「片段生長」	指	最普遍使用的策略，將片段培育成分子量更大及效力更強的化合物
「片段鏈接」	指	一種常用的策略，將結合到靶點的不同子口袋的兩個片段相鏈接
「GLP」	指	良好實驗室規範，與非臨床健康及環境安全研究的規劃、執行、監測、記錄、存檔及報告的組織過程及實施條件有關的質量管理體系
「GMP」	指	生產質量管理規範，為符合產品生產及銷售的授權及許可機構的建議指引而須遵循的慣例
「GPCR」	指	G蛋白偶聯受體，包含整合膜蛋白質，包含一個細胞外氨基末端、七個跨膜 α -螺旋結構域及一個細胞內羥基末端，其可識別從光子到離子、蛋白質、神經遞質及激素等多種信號
「GPU」	指	圖形處理單元，一種專門的電子電路，旨在快速操作及改變內存，以加速圖像的創建
「生成式人工智能」	指	一種可利用生成式模型生成新內容，例如文本、圖像或其他媒介的人工智能形式。生成式人工智能模型學習其輸入訓練數據的類型及結構，其後生成具有類似特徵的新數據。
「hERG」	指	人類ether-a-go-go相關基因，該基因(KCNH2)編碼一種名為Kv11.1的蛋白質(為鉀離子通道的 α 亞基)

技術詞彙表

「高通量」	指	描述通常通過使用機器人提高自動化水平以增強擴展性的過程
「高通量篩選」	指	一種藥物發現過程，利用自動化設備快速檢測數千至數百萬個樣本在模式生物、細胞、途徑或分子水平方面的生物活性
「苗頭化合物」或 「苗頭分子」	指	化合物篩選的產物，已證明對目標蛋白質具有特異活性
「同源的異構體」	指	自同一基因產生的異構體，但具有不同的氨基酸序列及生物學功能
「雜交瘤」	指	由B細胞和骨髓瘤細胞融合而成的混合細胞培養
「吸濕性」	指	固體物質吸收周圍大氣濕度的趨勢
「免疫原性」	指	抗原等特定物質在人體及其他動物體內引起免疫應答的性能
「免疫代謝」	指	專注於細胞代謝在免疫細胞管理中的職能的新興領域
「免疫療法」	指	利用免疫系統治療疾病
「適應症」	指	使用特定檢測、藥物、器械、程序或手術的正當理由
「具有人工智能大腦的 智能機器人科學家」	指	人工智能賦能的機器人，可以像人類科學家一樣進行推理及獨立開展實驗以檢驗假設並解釋研究結果，而僅需較少人類指導
「原位」	指	原處，或應在的位置
「計算機式」	指	通過計算機建模或計算機模擬進行或產生

技術詞彙表

「體外」	指	在玻璃內，使用已從其通常的生物環境中分離的組織的組分，如微生物、細胞或生物分子進行的研究
「體內」	指	活體內，體內研究指測試各種生物實體對整個活的生物體或細胞（通常是動物（包括人體）及植物）的影響，有別於對組織提取物或死去生物體進行的研究
「IND」	指	研究性新藥，該申請是監管機構確定是否允許進行臨床試驗的藥物審批過程的第一步
「IRAK4」	指	白細胞介素-1受體相關激酶4，是IL-1-及Toll樣受體下游信號轉導複合物的重要組成部分
「異構體」	指	具有相似但不完全相同氨基酸序列的任何兩種或兩種以上功能相似的蛋白質，由不同基因編碼或由同一基因但去除不同外顯子的RNA轉錄物編碼
「kJ/mol」	指	千焦每摩爾
「LaaS」或 「實驗室即服務」	指	允許測試團隊在虛擬實驗室進行研發試驗而無需購買實驗室基礎設施的服務
「先導化合物」 或「先導分子」	指	具有生物活性或藥理作用及治療特性的化合物
「LIMS」	指	實驗室信息管理系統，一種基於軟件的系統，使公司能夠有效管理實驗室及相關數據，以提高實驗室效率
「大語言模型」或「LLM」	指	大語言機器學習模型，一種利用深度學習技術及海量數據集來理解、總結、生成及預測新內容的人工智能算法

技術詞彙表

「機器學習」	指	對算法及統計模型的科學研究，計算機系統可利用該等算法及統計模型在無明確編程的情況下有效地執行特定任務
「分子動力學」	指	分子動力學，一種用於理解系統中粒子運動的計算機式模擬方法
「mg/L」	指	毫克每升
「MicroED」	指	微晶電子衍射，結構生物學中的一種新興技術，即在低溫條件下使用透射電子顯微鏡研究微晶或納米晶體
「分子雜合」	指	一種藥物設計及開發的新概念，其基於不同生物活性物質的藥效部分的組合產生一種新型混合化合物，該種化合物具有更強的親和力及藥效，以及更低的不良副作用
「分子力學」	指	一種用於計算分子特性的經驗方法，該方法超出分子幾何構型的範圍，涉及生成熱、應變能、偶極矩及振動頻率的測定
「分子模擬」	指	利用一些基本物理定律對原子及／或分子間的相互作用進行計算機模擬
「單一療法」	指	使用單一藥物治療疾病或病症的療法
「NGS」	指	新一代測序，一種確定DNA或RNA序列的技術，用以研究與疾病或其他生物學現象相關的基因變異
「新材料」	指	與傳統材料相比，在(物理或功能)性能方面具有明顯優勢的任何新的或已顯著改進的材料
「節點池」	指	集群內共享相同配置的一組節點，可用於快速創建、管理及銷毀節點，而不影響集群

技術詞彙表

「正交驗證」	指	一種通過基於非抗體方法驗證抗體染色的先進驗證方法
「臨床前候選化合物」	指	臨床前候選化合物
「PCT」	指	專利合作協定
「藥效學」或「PD」	指	藥理學的一個分支，研究藥物的作用及其對人體的影響
「藥代動力學」或「PK」	指	藥理學的一個分支，研究藥物在體內的循環過程，包括藥物的體內吸收、分佈、代謝及排洩，與藥效學共同影響藥物的劑量、功效及不良反應
「I期臨床試驗」	指	對健康人類受試者或患有目標疾病或病症的患者給藥的研究，測試安全性、劑量耐受性、吸收、代謝、分佈及排洩情況，並在可能的情況下了解其藥效的早期適用症
「II期臨床試驗」	指	對有限數量的患者群體給藥的研究，以確定可能的不良反應及安全風險，初步評價該產品對特定目標疾病的療效，並確定劑量耐受性及最佳劑量
「PI3K」	指	一個或多個磷酸肌醇3-激酶，為PI3K/AKT/mTOR通路的一部分，而PI3K/AKT/mTOR通路為各種細胞功能（如生長控制、新陳代謝及轉譯起始）的重要信號通路
「多晶風險」	指	未預期晚出現多晶型物的風險
「多晶型」	指	固體化合物出現多於一種晶型，該等晶型具有相同的溶液及蒸汽，惟具有略微差別的物理及（在一些情況下）化學性質的現象
「概念驗證」	指	概念驗證

技術詞彙表

「PROTAC」	指	蛋白降解靶向嵌合體，一種異質雙功能小分子，由兩個活性域和一個連接物組成，能夠去除特定不需要的蛋白質
「臨床前研究」	指	在非人類受試者上測試藥物的研究或計劃，以收集功效、毒性、藥代動力學及安全性信息，並確定藥物是否可以進行臨床試驗
「蛋白質序列」	指	蛋白質中氨基酸的排列
「PTEN」	指	磷酸酶與張力蛋白同源物基因，為癌症中最常見的失活腫瘤抑制基因之一
「QSAR」	指	定量構效關係，一種映射分子如何與生物活動或化學反應等過程關聯的方法
「量子計算機」	指	一款新型計算機，在超級計算機硬件及算法的設計和建設中直接利用量子力學，其預期優勢是大大提高計算速度及效率
「量子計算」	指	由計算機科學、物理學及數學等組成的多學科領域，同時利用量子力學，可較經典計算機更快速解決複雜問題
「量子力學」或「QM」	指	研究原子及亞原子層面粒子行為的數學描述的物理學分支，提供了一個理解原子、分子及亞原子粒子行為的框架，為量子計算的一個主要組成部分
「量子物理學」	指	從最基本的層面研究物質及能量，旨在揭示自然界構成要素的特性及行為，包括量子力學、量子場論及量子電動力學等多個子領域

技術詞彙表

「基於量子物理的計算」	指	一種計算方法，其利用量子物理學在原子或分子層面上研究及預測材料的自始特性及行為
「研發」	指	研究及開發
「R基團替換」	指	替換碳原子或氫原子與分子其他部分相連的任何基團
「RNA」	指	核糖核酸，一種聚合分子，在基因的編碼、解碼、調控及表達等各種生物學作用中必不可少
「骨架」	指	分子、化合物或序列的核心結構
「骨架躍遷」	指	計算機輔助搜索含有不同核心結構的活性化合物
「選擇性」	指	藥物優先影響特定細胞群的能力
「SMILES」	指	簡化分子線性輸入規範，一種允許用戶以計算機可用的方式表示化學結構的化學表示法
「溶劑」	指	任何有能力溶解一種或多種物質，形成溶液的物質（通常為液體）
「平方米」	指	平方米
「構效關係」或「SAR」	指	一種研究活性配體化合物中的藥效團或化學母體或官能團與其想要達成的藥理活性之間的定性關係的方法
「群體機器人」	指	一種協調大量相對簡單機器人的新方法，靈感來自於社會性昆蟲
「固態研發」	指	固態材料的物理及化學特性的研究與開發

技術詞彙表

「疫苗」	指	實現對特定疾病的主動獲得性免疫的生物製劑
「濕實驗室」	指	配備適當的管道系統、通風系統及設備，以便進行親身科學研究與實驗的實驗室
「XFEP」	指	一個評估候選分子與大規模生物靶點之間的結合親和力的自由能微擾預測平台，並於濕實驗室實驗前過濾假陽性結果
「XFF」	指	XForce Field，針對藥物或新材料發現及開發的新一代通用分子力場平台
「XPose」	指	結合不同採樣和評價算法的優點，以更準確地預測小分子靶點－配體結合構象的結合構象預測技術