

胡乔宇　博士

特聘研究员、博士生导师

● 教育和工作背景:

2011 年，中国石油大学（北京），化学工程与工艺专业，工学学士；

2014 年，中国科学院大学（过程工程研究所），化学工艺专业，工学硕士；

2020 年，美国迈阿密大学，计算化学专业，理学博士；

2020/10—2022/10，上海科技大学，免疫化学研究所，博士后；

2022/11—2025/10，华东师范大学，药学院，副研究员、硕士生导师；

2025/11—2026/6，上海恒瑞医药有限公司，分子信息部，主任研究员；

2025/10—至今，南昌大学，基础医学院/生物医学创新研究院，特聘研究员、博士生导师；

● 研究兴趣、领域:

课题组综合运用计算化学、计算生物学以及人工智能等方法和技术，开展小分子药物（包括 PROTACs 和分子胶）的理性设计研究。开发了首个 PROTACs 降解效率预测分类器及 PROTAC 从头生成工具，并构建了天然产物的手性预测与构象生成模型、基于靶标三维结构的小分子扩散生成模型，实现了靶向分子的高效生成与多目标性质优化。针对多种药物关键靶标，开展小分子抑制剂和 PROTACs 的设计与湿实验验证，形成“AI 药物分子设计-湿实验验证”的研究闭环。近年来以第一或通讯作者在 *Nature Communications*, *PNAS*, *Developmental Cell*, *Briefings in Bioinformatics*, European Journal of Medicinal Chemistry, *Journal of Chemical Information and Modeling*, *WIREs Computational Molecular Science* 等较有影响力的 SCI 杂志上发表文章二十余篇，申请发明专利一项，参与著作《人工智能与药物设计》一书，是多项期刊如 *Journal of Cheminformatics*、*Scientific Reports*、*Molecular Diversity*、*npj Drug Discovery*、*npj Computational Materials* 的审稿人。

未来，课题组将在继续深入研究小分子药物设计方法的基础上进一步拓展研究方向，主要开展多肽（特别是环肽）药物的理性设计、抗体蛋白的创新设计和小核酸药物的设计。

- **学术兼职：**

上海市药学会会员、上海市人工智能药学专委会青委会委员

- **主要成果、荣誉、奖励（代表性即可，原则上不超过 10 项）：**

[1] **Qiaoyu Hu**[1,*], Changzhi Sun[1], Huan He[1], Jiazheng Xu[1], Danlin Liu[1], Wenqing Zhang, Sumeng Shi, Kai Zhang, Honglin Li[*]. Target-aware 3D molecular generation based on guided equivariant diffusion. ***Nat. Commun.***, 2025, 16, 7928.

[2] **Qiaoyu Hu**[1,*], Yu Cao[1], PengXuan Ren[1], Xianglei Zhang, Fenglei Li, Xueyuan Zhang, Fengyu Cai, Ran Zhang, Yongqi Zhou, Lianghe Mei[*], Fang Bai[*]. DeepDegradome: A Structure-Aware Deep Learning Framework for PROTAC and Ligand Generation Against Protein Targets. ***Proc. Nat. Acad. Sci. USA.***, 2026, DOI: 10.1073/pnas.2518248123.

[3] Fenglei Li[1], **Qiaoyu Hu**[1], Xianglei Zhang[1], Renhong Sun[1], Zhuanghua Liu[1], Sanan Wu, Siyuan Tian, Xinyue Ma, Zhizhuo Dai, Xiaobao Yang[*], Shenghua Gao[*] and Fang Bai[*]. DeepPROTACs is a deep learning-based targeted degradation predictor for PROTACs. ***Nat. Commun.***, 2022, 13, 7133.

[4] Fenglei Li[1], **Qiaoyu Hu**[1], Yongqi Zhou, Hao Yang, Fang Bai*. DiffPROTACs is a deep learning-based generator for proteolysis targeting chimeras. ***Brief. Bioinform.***, 2024, 25, bbae358.

[5] ShaoxuanWu[1], Lin Lin[1], Qiaoyu Hu[1], Xuebo Yao[1], Hongyang Wang[1], Shuang Liu, Qingling Liu, Yuehui Xi, Yuzhe Lin, Jianqiao Gong, Ruixing Hu, Wei Zhan, Yi Luo, Guang He, Zhijun Liu, Wei Xiong, Qiuju Wang[*], Zhigang Xu[*], Fang Bai[*], Qing Lu[*]. Mechano-electrical transduction components TMC1-CIB2 undergo a Ca^{2+}-induced conformational change linked to hearing loss. ***Dev. Cell.***, 60(11), 1586-1600.e4.

[6] **Qiaoyu Hu**, Vindi M. Jayasinghe-Arachchige, Rajeev Prabhakar[*]. Degradation of a main plastic pollutant polyethylene terephthalate by two distinct proteases (neprilysin and cutinase-like enzyme). ***J. Chem. Inf. Model.***, 2021, 61, 764-776.

[7] **Qiaoyu Hu**, Vindi M. Jayasinghe-Arachchige, Gaurav Sharma, Leonardo F. Serafim, Thomas J. Paul and Rajeev Prabhakar*. Mechanisms of peptide and phosphoester hydrolysis catalyzed by two promiscuous metalloenzymes (insulin degrading enzyme and glycerophosphodiesterase) and their synthetic analogues. ***Wiley Interdiscip. Rev. Comput. Mol. Sci.***, 2020, 10, e1466.

[8] 白芳，高盛华，蒋华良，李风雷，**胡乔宇**，刘壮华；基于神经网络的PROTAC分子降解率的预测系统及其构建方法，2021-9-07，中国，202111043888.3。

[9] 上海市“超级博士后”激励计划资助。

[10] 上海市科学技术委员会，计算生物学专项，药物分子精准生成和优化方法开发与应用研究子课题，2024-11 至 2027-10，在研，主持。

联系方式：

电话：15378761603

E-mail: deqiaoyu@ncu.edu.cn