



网站搜索
Search

关键词:

搜索类别:

[搜索](#) [高级搜索](#)

有机合成与药物化学中的（量子）计算化学研究取得新进展

昆明植物研究所

近日, 由昆明植物所朱华结研究员主持的研究成果“有机合成与药物化学中的（量子）计算化学研究”荣获2008年度云南省自然科学二等奖。

该成果通过开展“（量子）化学计算-催化有机合成-天然产物类似物的设计合成与活性研究”多学科的交叉研究, 将（量子）计算化学方法应用于不对称催化反应、复杂天然产物结构解析、药物分子的合成等方面, 取得多项成果:

以天然产物相思子碱为原料, 合成出三大类新的手性催化剂共170余个, 筛选到选择性在99%左右的手性催化剂; 发现了可用于手性催化剂设计的奇-偶（碳）现象, 并从理论上给予了解释。最终将这些好的催化剂应用于抗HIV-1的活性化合物的手性中心控制, 在手性活性化合物的合成研究中取得了好的手性中心控制效果。

利用（量子）计算方法（如DFT, MP2）鉴定了一些天然化合物的结构, 纠正了早期曾被错误地鉴定的专利结构。针对量子化学方法难用于非环手性药物分子绝对构型鉴定的现状, 建立了具有原创性的MATRIX方法; 建立了多羰基天然化合物的化学选择性还原反应过渡态能量-温度的标准曲线, 指导了多羰基天然化合物的化学选择性还原反应。发现了温和条件下的伯酰胺转化为甲酯的选择性转化反应, 并从理论上解释了其合成机理。

合成了130余个含有CON-OH(R)结构特征天然产物类似物, 其中9个有较好的抗癌活性; 研究了手性CONCENTRICOLIDE类似物的合成和构效关系, 并通过计算研究鉴定出了CONCENTRICOLIDE的绝对构型为(S)。利用天然氨基酸, 设计并合成了一类新型的中枢神经保护活性化合物, 发现了4个候选化合物; 合成了系列金属Pt类抗癌活性化合物。

项目研究共发表SCI论文20篇, 获得授权发明专利3件。

中国科学院-当日要闻

- 中科院隆重举行迎“七一”升国旗仪式
- 他用短暂一生诠释了“上海光源精神”
- 陈宜瑜、郝远到寒早所调研
- 四川省副省长李成云视察成都分院
- 中国科学院第二次人才工作领导小组会议召开...
- 中国科学院部署推动“两平台”建设
- 浙江省-中科院科技合作现场交流会举行
- 空间科技创新基地召开第三次所长联席会
- 路甬祥调研苏州纳米所、苏州医工所
- 白春礼专题调研纳米科技环境应用