

## 上海药物所研究员朱维良、许叶春访问广州生物院

文章来源：广州生物医药与健康研究院

发布时间：2014-05-20

【字号：小 中 大】

5月16日，中国科学院上海药物研究所研究员朱维良和许叶春应邀访问中科院广州生物医药与健康研究院，并分别作了题为“药物设计中的计算模拟”和“水分子在PDE5与抑制剂识别中的重要作用”的学术报告。广州生物院相关领域科研人员和研究生参加了报告会，报告会由广州生物院化学生物学研究所研究员许永主持。

朱维良主要介绍了他近年来在药物设计中计算模拟的研究成果。其实验团队通过量子化学手段证明了卤键在生物化学中的重要地位，他们结合现有的生物模拟软件开发了一种包含卤键评价的新打分函数。其次，朱维良还介绍了分子动力学在生物化学中的重要性。对于生物蛋白的某些特殊运动（例如毫秒级的运动）用分子动力学软件是很难实现的，因此朱维良团队自行研发出一种新的算法来快速模拟这种特殊的蛋白运动，并用三个实例来证明新算法的准确性。许叶春介绍了水分子和卤键在PDE5与抑制剂识别中的重要作用，他主要结合结构生物学、热力学和量子化学计算来分析卤键和结构水在PDE5与抑制剂结合中的贡献。两位教授的相关研究成果已发表在*J Med Chem*上，为多学科交叉的药物发现和优化研究提供了成功范例。

大家对报告内容表现出浓厚的兴趣并同两位教授展开了热烈的交流和讨论。报告会后，广州生物院化学所相关科研人员还与朱维良和许叶春就下一步的合作进行了深入探讨。

朱维良于2004年加入上海药物所，先后主持国家自然科学基金、十二·五重大新药创造专项子课题、十一·五及十二·五国家“863”课题、上海市科委基础重大等科研课题。主要研究领域为计算机辅助药物设计、计算生物学及药物化学，特别专注于药物设计新方法、新理论的发展，以及这些方法在糖尿病、肿瘤及传染性疾病药物发现方面的应用研究。

许叶春于2009年通过中科院“百人计划”人才引进项目加入上海药物所工作。其主要研究领域是通过计算和实验紧密结合的手段研究阿尔茨海默症等重大疾病密切相关的靶标蛋白质与小分子相互作用的分子机制，阐明靶标蛋白质的动态功能结构，并针对多个靶标发现大量活性化合物。已发表研究论文50余篇，主持国家自然科学基金、中科院“百人计划”和上海市“浦江人才”计划等科研项目多项。

打印本页

关闭本页