

## 金素有机大分子的结构设计及其生物医学应用研究

Thursday, 6 July 2017 15:00 (20 minutes)

金素有机大分子便于在生物体内做精确定量，并具有良好的光稳定性，加之其优异的生物相容性及靶向性，能够实现对目标蛋白的高灵敏结合，这些使得金素有机大分子在纳米生物医学领域具有广阔的应用前景。我们利用分子模拟方法，首先针对金素有机大分子的分子结构进行初始设计优化，揭示金素与氨基酸结合界面的作用机制；进一步设计分子结构中的靶向单元，结合相应的生物医学实验，探索金素有机大分子靶向体系与目标蛋白相互作用的分子机制。金素与天然氨基酸的结合不同于传统的巯基小分子保护，同时金素有机大分子靶向体系与目标蛋白的特异性结合涉及多种调控因素及其协同作用，这些都为系统研究其中生物分子界面作用机制的科学问题带来很大挑战。我们的分子模拟研究结果有针对性的设计构建了新型金素有机大分子的分子结构，并有效设计实现了金素有机大分子的靶向性能，最终完成对重要目标蛋白的靶向结合与定量检测。利用上述研究结果/思路，能够有效设计制备系列金素有机大分子，为解决其中的生物分子界面作用机制问题，及其应用于活细胞靶向检测/靶向治疗的核心科学问题等奠定基础。

**Presenter:** 赵丽娜 (IHEP)

**Session Classification:** 物理软件与数据处理 III

**Track Classification:** 科学计算应用及成果