

## 科学家绘制出完整药用小分子空间“地图”

文章来源：科技日报 常丽君

发布时间：2013-04-24

【字号：小 中 大】

据物理学家组织网4月23日（北京时间）报道，美国杜克大学化学家最近开发出一种新的计算机算法，能模拟出所有的含碳小分子，经过分类编目后形成一份特殊的小分子空间“地图”，帮助化学家在实验室里将这些分子真正制造出来。这一成果有望成为药物开发人员的得力工具，以寻找更有效的药物和新材料。相关论文在线发表于4月的《美国化学协会会刊》上。

小分子空间（SMU）是所有分子量在500道尔顿及以下、具有合成可能性的有机分子。这类分子约有1060种。目前的资料库只描述了小分子空间中约10亿种分子，迄今合成出来的化合物约有1亿种。而且这些分子在结构上很相似，很多来自空间中的同一区域。在那些未曾探索过的区域里，更可能存在着最棘手难题的分子答案。

为探索化学空间里的新区域，研究人员设计了一种新的计算机算法来绘制整个小分子空间。杜克大学博士后亚伦·威夏普编写了新算法，让小的随机化学反应变成苯环结构，然后按照与之相符的小分子空间位置，给生成的新分子分类编目。

其中最大的困难是，找出哪种分子才是能在实验室合成的化合物。威夏普把他早期构建出来的新分子绘成草图，送到一些合成化学家那里，让他们标注这些分子中哪些合成出来不稳定，或根本就不能合成。然后把这些意见加入算法规则，按照新的算法规则，这类化合物就不会再构造出来。

经过10次这样的反复，他构建出一个含有900万个分子的虚拟数据库，其中的化合物能代表小分子空间内的每个区域，并绘制出新的“地图”，显示化学空间中尚未合成出其中任何化合物的空白区域。

“有了这份‘地图’，化学家们只要能合成出这个区域内的一种新分子，就造出了一种新型化合物。”威夏普说，“只要是在小分子‘地图’上的空白区域里，就保证造出的东西还没有人申请过专利。”

目前，研究小组已经在线发布了该算法的源代码，并希望科学家能立刻着手挖掘小分子空间中尚无人探索的区域，发现新的化合物。

打印本页

关闭本页