



## 科研进展

首页 » 新闻动态 » 科研进展

头条新闻

科研进展

科研活动

党建群工

通知公告

学术活动预告

### 解析药物改造中的“蝴蝶效应”

【发布时间：2019-03-14】 【关注度：351】

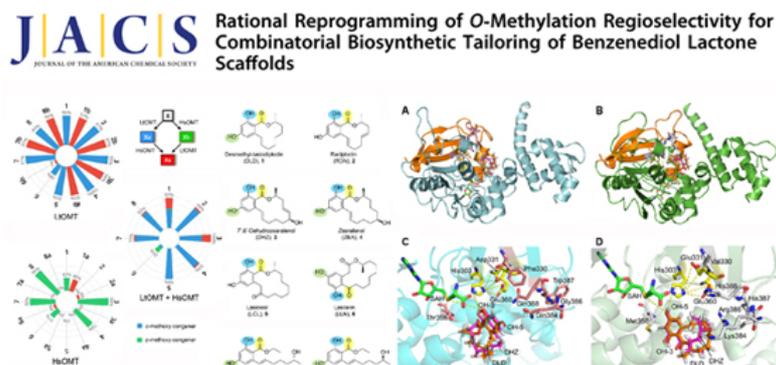
据悉，生物技术研究所徐玉泉研究组和美国亚利桑那大学伊斯万·莫纳（Istvan Molnar）教授团队合作，在真菌氧甲基转移酶的理性设计和结构改造研究上取得突破。相关研究成果近日发表于化学类国际顶级期刊《美国化学会志》（Journal of American Chemical Society, 影响因子14.357）上。

医药、农药、食品添加剂等都是生活、生产中常见的药物分子，药物分子结构决定着它们的理化性质和药理活性，研究发现，小分子药物结构上一个基团的变化，比如不同位点的甲基化，就像蝴蝶扇动了一下翅膀，使得药物活性发生巨大的变化。与化学合成方法相比，基于酶的生物催化技术具有简易高效、节能环保、选择性专一等优点。因此，解析药物结构变化的“蝴蝶效应”的发生机理并且掌握这种改造技术，对药物创制以及药物分子的定向改良具有重要应用前景。

本研究以两种真菌氧甲基转移酶LtOMT和HsOMT为研究对象，利用蛋白质同源建模等技术解析出二者在催化位点上产生差异的分子机制。随后，通过多肽片段交换和氨基酸定点突变等手段理性设计、合理改造LtOMT的结构，重塑其催化位点，成功开发出一种能够定向改造氧甲基化生物催化元件的技术。应用改造后的LtOMT，在多种多酚类药物先导化合物上实现了氧甲基化修饰方式的改变，改善了这些小分子的理化性质。

徐玉泉研究组表示，基于多组学和大数据资源，可以进行生物催化元件的大量挖掘，利用合成生物学技术理性设计这些元件，是实现药物先导化合物结构优化的一条全新技术路线，已经成为新型药物开发的发展方向之一。

原文链接：<https://pubs.acs.org/ccindex.cn/doi/10.1021/jacs.8b12967>



中国农业科学院生物技术研究所 ©2015

地址：北京市海淀区中关村南大街12号 邮编：100081

技术支持：中国农业科学院农业信息研究所

 京公网安备 11010802022110号 京ICP备07026971号-4



[网站地图](#)

[联系我们](#)

[旧版回顾](#)