

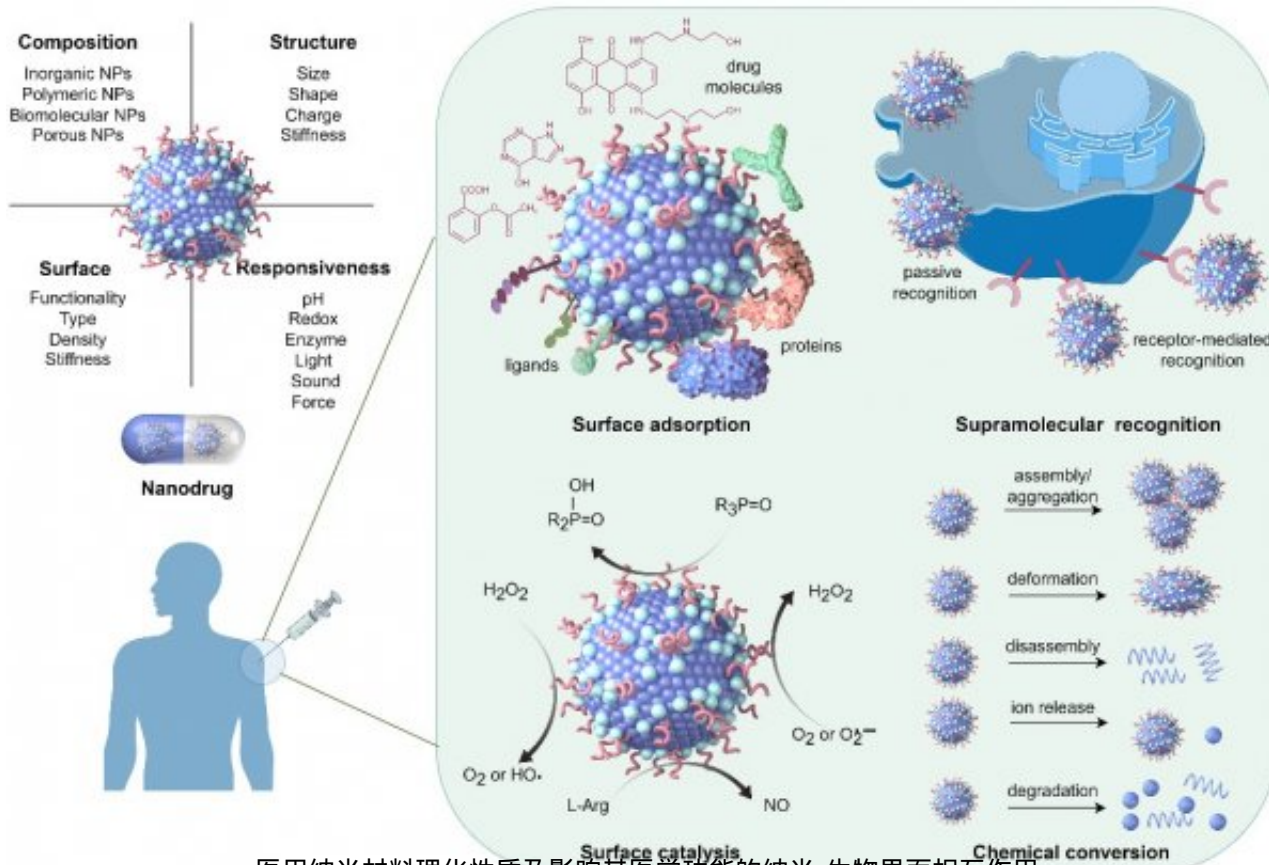
国家纳米中心等在医用纳米材料理论研究方面获进展

近日，中国科学院国家纳米科学中心高兴发团队在医用纳米材料理论研究方面取得进展。相关研究成果以Computer-aided nanodrug discovery: recent progress and future prospects和Optimizing the standardized assays for determining the catalytic activity and kinetics of peroxidase-like nanozymes为题，分别发表在《化学学会评论》（Chemical Society Reviews）与《自然-实验手册》（Nature Protocols）上。该团队综述了医用纳米材料设计的最新研究动态，展望了未来发展方向，并提出了计算辅助设计和标准化实验方法在推动领域发展方面的作用。

纳米材料因独特的物理化学特性，在疾病预防和治疗方面展现出潜力。然而，面对众多的纳米材料种类和复杂的纳米-生物界面相互作用，实现具有特定生物学功能的纳米材料的精准设计和筛选面临挑战。计算机集群和算法的快速发展为实现这一目标提供了契机。该研究探讨了计算机辅助医用纳米材料发现的潜力，强调了计算方法在揭示纳米材料与生物分子间关键界面相互作用如表面吸附、超分子识别、表面催化和化学转化等方面的重要意义。这些相互作用是决定纳米材料医学功能的关键因素。同时，该团队研究了机器学习技术如何通过分析大量实验和计算数据来预测纳米材料的医学功能，为个性化精准医疗提供了新途径。这种跨学科的创新整合可以加速医用纳米材料的研发进程，为未来精准纳米药物的设计和筛选提供技术支持，实现更高效、更安全的治疗方式以满足临床治疗的个性化需求。

纳米材料的类酶催化活性是其生物学应用的关键特征。为了促进具有类酶催化活性的医用纳米材料的发展，需要精确调控其活性位点的几何和电子结构，以优化催化活性和底物选择性。因此，对这类纳米材料的催化活性和动力学特性的准确表征变得至关重要。为此，高兴发团队与北京理工大学梁敏敏团队合作，提出了改进的标准化方法。这一方法结合传统酶的米氏动力学和纳米材料的理化性质，能够更准确地描述不同形状、尺寸和组分的类过氧化物酶纳米材料的动力学活性。该方法有助于全面评估不同类酶催化纳米材料的酶学特性，对推动这些医用纳米材料在实际应用中的发展具有重要意义。考虑到现有的催化活性测定技术以及活性位点数量与表面积的计算技术已相对成熟，这种优化的表征方法有望在纳米医学领域得到更广泛的应用，为设计和筛选具有特定生物学功能的纳米材料提供实验支持。

研究工作得到国家重点研发计划和国家自然科学基金等的支持。



医用纳米材料理化性质及影响其医学功能的纳米-生物界面相互作用

原文地址：<http://www.china-nengyuan.com/tech/215549.html>