国家纳米中心等提出筛选抗菌纳米材料的集成方案

作者：writer 来源：中国科学院

本文原地址：https://www.iikx.com/news/progress/26002.html

本文仅供学习交流之用，版权归原作者所有，请勿用于商业用途！

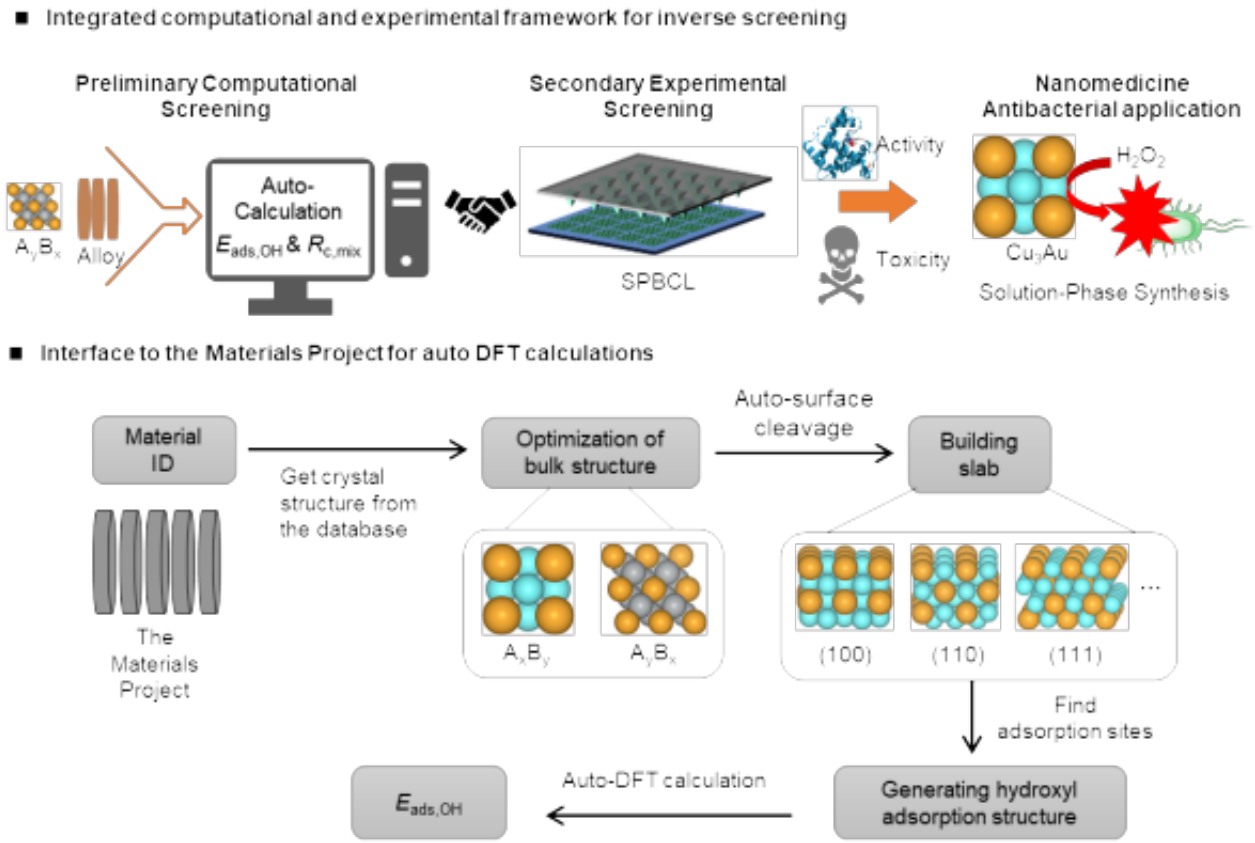
近日，中国科学院国家纳米科学中心高兴发课题组等在纳米毒理化学的理论设计方向取得了新进展。相关研究成果以《抗菌纳米药物反向筛选的计算与实验集成方案》（*Integrated Computational and Experimental Framework for Inverse Screening of Candidate Antibacterial Nanomedicine*）为题，发表在*ACS Nano*上。该成果在课题组提出的催化信号转导理论的基础上，发展出一套集成了科学计算与3D打印技术的方案，实现了在材料数据库中高效地、准确地筛选出具有抗菌潜力的纳米材料，并通过湿法实验进行了验证。

高兴发课题组致力于纳米毒理化学的基础理论研究，发展了相关理论模型与计算机辅助方案，在少量实验或无需实验的条件下预测纳米材料杀死有害细胞、保护正常细胞等生物医学功能，以期缩短相关医用纳米材料的研究周期、节约研究成本。该研究基于纳米材料通过表面催化作用活化H_2O_2，氧化细菌有机质，杀死细菌这一关键化学机制，利用此前提出的纳米表面活化H_2O_2理论模型，预测纳米材料的抗菌活性。同时，该研究利用前人提出的纳米材料细胞毒性的定量构效关系（Nano-QSAR）模型，预测材料对正常细胞的安全性，发展了在Materials Project材料库中高通量筛选合金纳米粒子的计算方案。该方案同时考虑了材料活化H_2O_2的抗菌活性以及对正常细胞的安全性，从而能够够筛选出具有高效抗菌活性同时对正常细胞具有较低毒性的抗菌材料。进一步，研究扫描探针嵌段共聚物光刻技术制备出高度均匀的金属/合金纳米颗粒，并进行二次实验筛选。计算和实验筛选结果表明，$AuCu_3$

3
纳米材料，并验证了其对正常细胞的安全性和优良的抗菌活性，证明了集成筛选方案的可靠性。

该研究由国家纳米中心、南京大学、湖南大学、南京林业大学合作完成。研究工作得到国家重点研发计划、国家自然科学基金和国家纳米中心等的支持。相关计算机程序已取得国家版权局计算机软件著作权登记认证。

论文链接



筛选抗菌纳米材料的“计算+实验”集成方案。该方案发展了针对材料数据库的计算机程序，实现了HO吸附能（$E_{ads,OH}$）的高通量自动计算，利用$E_{ads,OH}$预测合金纳米材料活化H_2O_2的催化活性，利用元素共价半径（$R_{c,mix}$）预测其细胞毒性，利用3D打印技术进行二次筛选，通过湿法化学进行实验验证，获得了具有优异抗菌活性的合金纳米材料。

研究团队单位：国家纳米科学中心

更多 科学进展 请访问 https://www.iikx.com/news/progress/

本文版权归原作者所有，请勿用于商业用途，爱科学iikx.com转发