



您的生物医药信息计算专家



量子化学计算服务指南

QUANTUM CHEMICAL CALCULATION

目录

- 01 公司简介
- 02 量子化学计算的有效应用
- 03 代表客户
- 04 案例 1 通过计算烯醇-酮式转化的反应过程阐明PET荧光探针的发光原理
- 05 案例 2 ECD光谱计算预测天然产物的绝对构型
- 06 案例 3 荧光光谱的预测
- 07 案例 4 通过HOMO-LUMO计算阐明PET荧光探针的发光原理
- 08 案例 5 通过计算D-A反应的反应过程推断天然产物的生源途径

公司简介

About Us

北京中大唯信科技有限公司始建于 2010 年, 发源于中山大学, 注册资金 500 万元。中大唯信致力于提供最专业的生物医药信息和计算解决方案, 核心业务是各类计算服务与软件产品, 涉及计算化学、化学信息学、分子模拟、药物设计、虚拟筛选、计算生物学、生物信息学、高性能计算、云计算、人工智能等各学科领域。中大唯信拥有一支高水平的技术和管理团队, 核心成员分别来自国内知名高校、研究所、医药和 IT 公司。公司现有博士学历成员占 70% 以上, 并邀请了海内外著名高校、企业和科研院所的多位专家学者担任顾问。业务遍及全国各地, 已累计为上百家客户提供了产品和服务, 在北京、上海、广州等地均有办事专员, 可提供 On-Site 服务。

中大唯信有两层含意。其一: 中大即为中山大学, 体现我们不忘初心、埋头耕耘的学院作风; 唯信即为以信息计算为主营业务, 体现我们的专业和务实精神。其二, 寓意泱泱中华之大, 唯诚信为立足之本, 是我们一直坚持的信用至上的商业理念。计算决定未来, 创新始于现在, 我们致力于用最尖端的技术和创新, 提供最先进、可靠、高效的产品和服务。

中大唯信一直坚持走自主研发的道路, 提供高质量的专业计算服务和开发有国际竞争力的原创专业软件。至今, 已为上百家高校、企业与科研院所提供服务, 开发了数十套信息计算软件系统和数据库, 例如: 科研成果管理系统、中药、化药、天然产物数据库、化合物管理系统、毒性预测系统、化合物筛选平台、疾病靶标数据库、高性能计算平台、分子动力学模拟平台等。研究成果已在国内外知名刊物上发表了若干论文, 并获得多项国家专利和软件著作权等。



量子化学计算

QUANTUM CHEMICAL CALCULATION

量子化学计算 (Quantum Chemical Calculation) 是利用量子力学的基本原理来进行分子结构计算及其性质分析的一种计算方法。对于基于分子力学和统计力学而发展的计算方法 (如分子对接和分子动力学等) 而言, 由于它们只能从原子水平上对分子进行描述计算, 而量子力学却能够从电子水平上对分子进行全面充分地考虑, 因此量子化学计算能够获得更高精度的计算结果, 尤其是在处理一些含弱相互作用 (如 $\pi - \pi$ 堆积作用等) 的体系中, 量子化学计算具有比其他计算方法更明显的优势。

由于量子化学计算是建立在电子水平上的计算, 这使得量子化学计算通常需要付出较高的时间成本来换取较高的计算精度, 因此量子化学计算是用于处理小分子体系的绝佳方法, 却不适合用于大分子体系的计算。通过量化计算, 可以研究小分子基态或者激发态状态下的结构、性质以及结构和性质之间的关系; 小分子与小分子之间的相互作用、相互反应以及过渡态结构的确定等。目前量子化学计算已经被广泛地用于材料与药物分子性质的计算、天然产物绝对构型的预测、荧光探针的确定、有机新反应的发现等多个方面。





量子化学计算能有效应用于：

结构计算

1. 基态结构优化及确定
2. 第 n 激发态结构优化及确定 ($n = 1, 2, 3, \dots$)
3. 势能面计算

性质计算

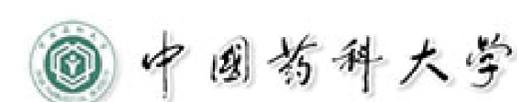
1. 轨道分析 (HOMO-LUMO 轨道能量计算等)
2. 静电势以及电荷布局
3. 偶极矩、可极化率、跃迁偶极矩计算
4. 光谱计算 (UV-Vis、IR、NMR-H 谱、NMR-C 谱、Raman、ECD、VCD、ROA、ORD、荧光、磷光等)
5. 频率计算 (焓、熵、自由能、激发能、电子亲和能、电离势计算)

相互作用计算

1. 分子间相互结合的结合能 (相互作用能) 计算
2. 分子间相互反应的反应自由能曲线以及过渡态结构的优化和确定

客户与合作伙伴

COLLABORATION
PARTNERS



案例

01

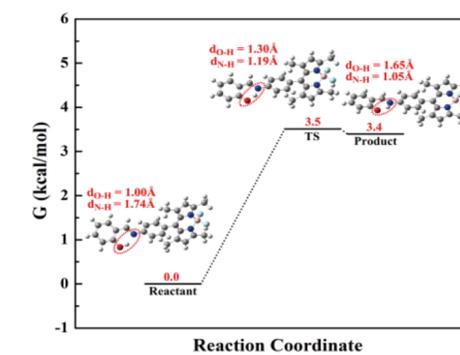
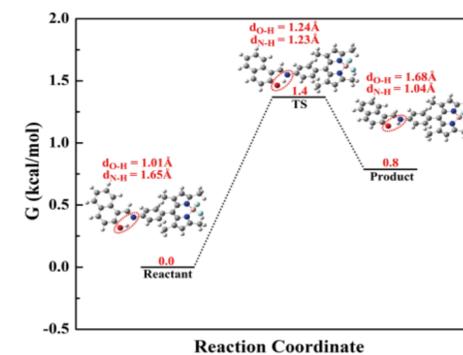
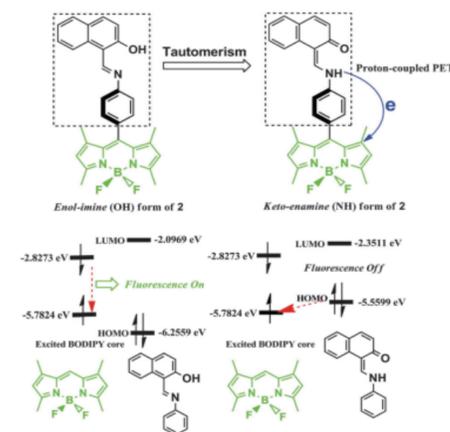
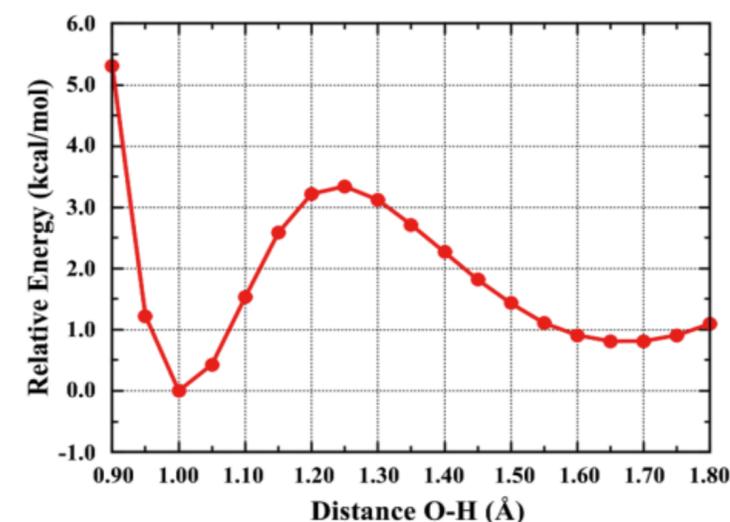
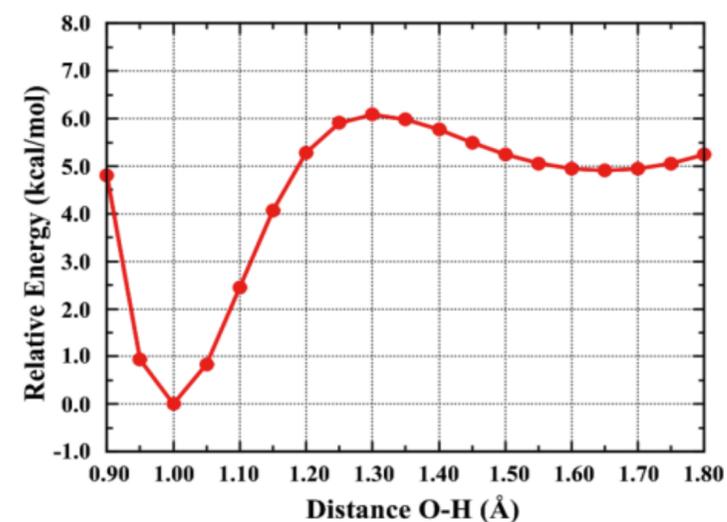
通过计算烯醇-酮式转化 反应过程阐明PET荧光探针的发光原理

在本案例中, 需要计算的小分子在不同浓度的甲苯-甲醇溶液中发射出不同强度的荧光。分析发现该小分子具有烯醇-酮式两种形式, 通过对烯醇-酮式反应过程以及过渡态结构地计算发现该分子在不同溶液中, 其烯醇-酮式转化过程呈现出不同的难易程度, 这就决定了烯醇式和酮式在不同溶液中分布概率不同, 而我们进一步的HOMO-LUMO计算发现, 只有烯醇式才能发射荧光, 而酮式无法发射荧光, 因此小分子在不同浓度的甲苯-甲醇溶液中发射出不同强度的荧光。



Reference

Experimental and theoretical study of enol-keto prototropic tautomerism and photophysics of azomethine-BODIPY dyads. *Phys. Chem. Chem. Phys.* 2014, 16(30), 16290-16301.



案例

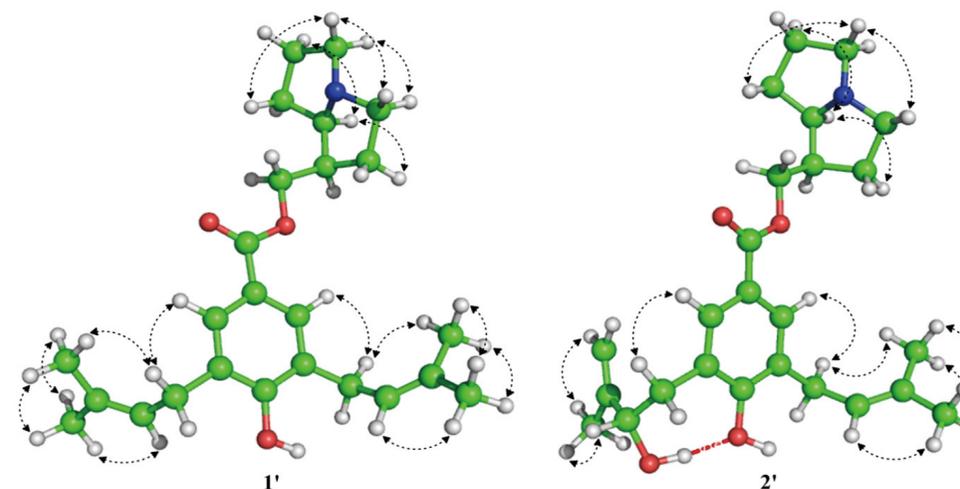
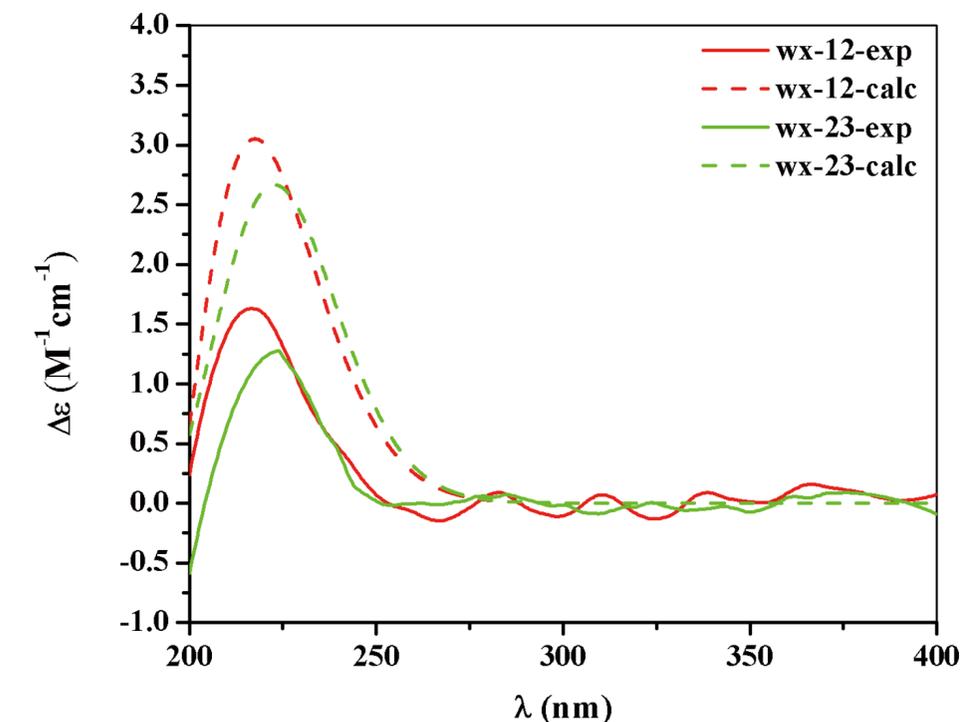
02

ECD光谱计算

预测天然产物的绝对构型

在本案例中，通过实验获得了 1' 和 2' 两个化合物，虽然通过 NMR-H 和 NMR-C 谱可以确定部分构型和部分 H 相关，但是却无法确定它们最终的绝对构型。ECD 的计算能够很好地解决这个问题。

首先，通过 ECD 计算获得了天然产物分子 1' 和 2' 的 ECD 曲线，在这里需要将 1' 和 2' 的各种构型和构象全面考虑，并计算每一个构型和构象的 ECD；然后将这些计算得到的 ECD 曲线与实验获得的 ECD 曲线进行拟合比较；最终与实验 ECD 曲线拟合最好的计算 ECD 曲线所对应的构型和构象就是分子 1' 和 2' 的绝对构型。ECD 的计算对于天然产物绝对构型的判定具有很好的指导和预测功能，而且准确率高。

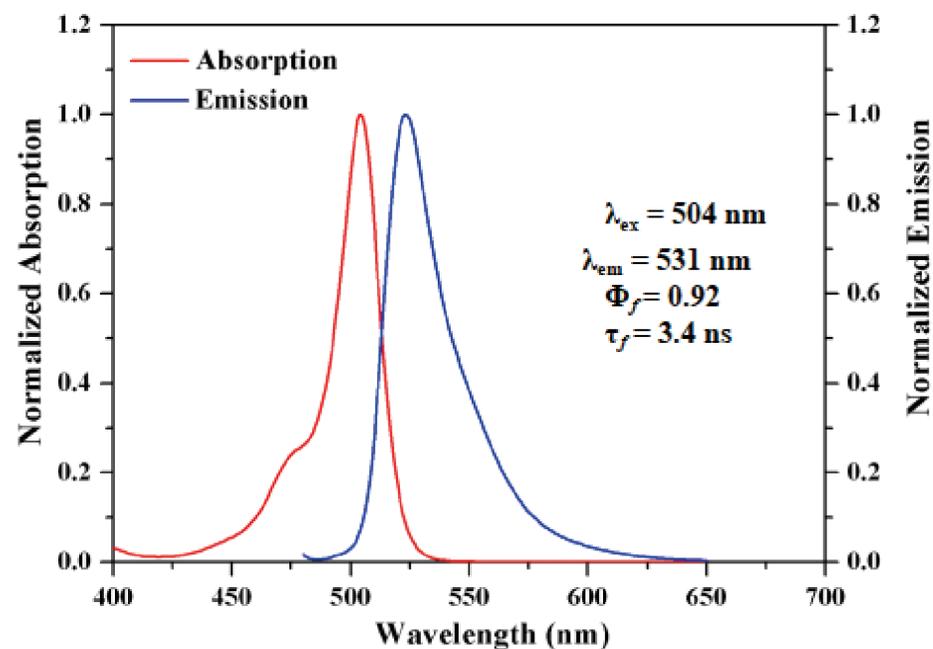
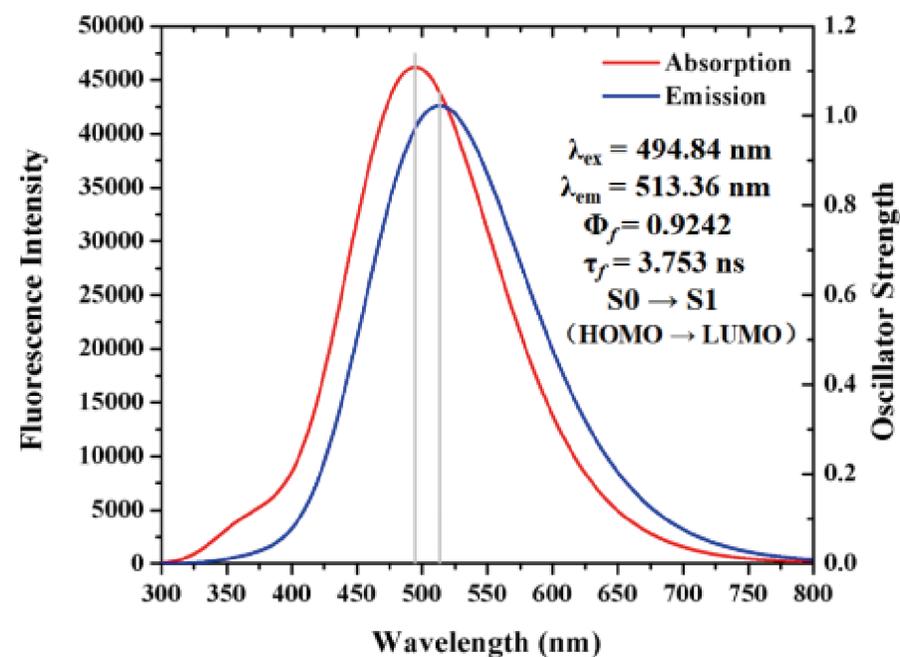


案例

03

荧光光谱 光谱的预测

在本案例中，上图为通过计算获得的某化合物的荧光光谱曲线，以及其对应的荧光量子产率和荧光寿命，下图为通过实验获得的荧光光谱曲线及其荧光量子产率和荧光寿命。因此，通过荧光光谱的计算，可以准确地预测化合物的荧光特征。荧光光谱以及相关的荧光性质的准确预测对于医药方面的荧光探针发现具有指导作用，能够极大地促进荧光探针的发现。



案例

04

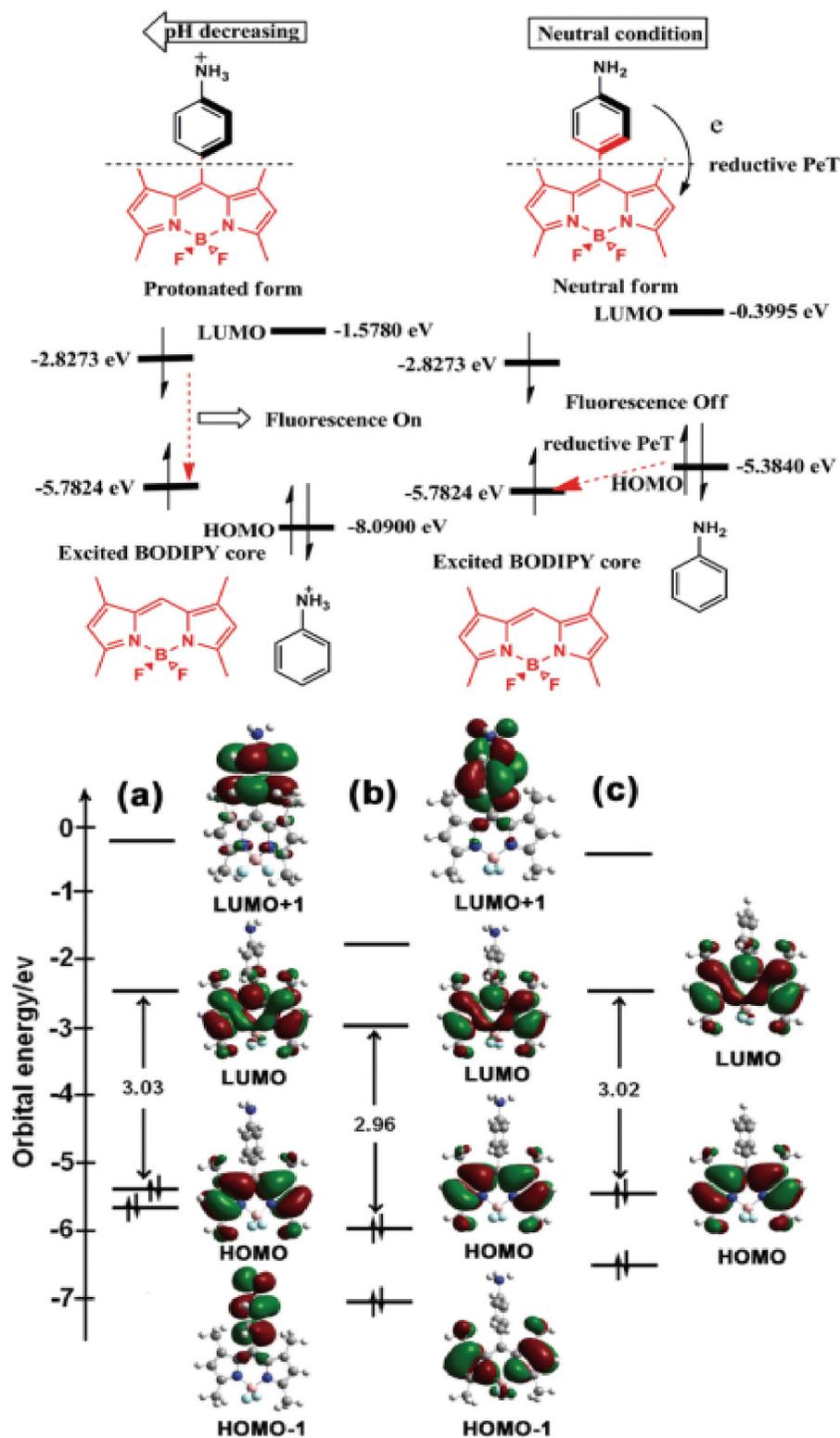
HOMO-LUMO

计算阐明PET荧光探针的发光原理

在本案例中 BODIPY 片段和 Phenylamino 片段组成了一个在低 pH 可以发射荧光，高 pH 下不能发射荧光的分子。通过进行 HOMO-LUMO 的计算发现，当在低 pH 时，Phenylamino 会发生质子化，从而使得其上的 HOMO 轨道能量低于 BODIPY 的 HOMO 轨道能量，因此当电子由 BODIPY 的 LUMO 轨道返回基态时就会直接回到 BODIPY 的 HOMO 轨道，而不会经过 Phenylamino 的 HOMO 轨道；但当在高 pH 时，Phenylamino 不会发生质子化，呈现中性化，从而使得其上的 HOMO 轨道能量高于 BODIPY 的 HOMO 轨道能量，这也就导致电子由 BODIPY 的 LUMO 轨道返回基态时就会先经过 Phenylamino 的 HOMO 轨道，再返回到 BODIPY 的 HOMO 轨道，而这个过程正好导致了荧光的猝灭。

Reference

A simple BODIPY-aniline-based fluorescent chemosensor as multiple logic operations for the detection of pH and CO₂ gas. Dalton Transactions 2014, 43(22), 8499-8507.



案例

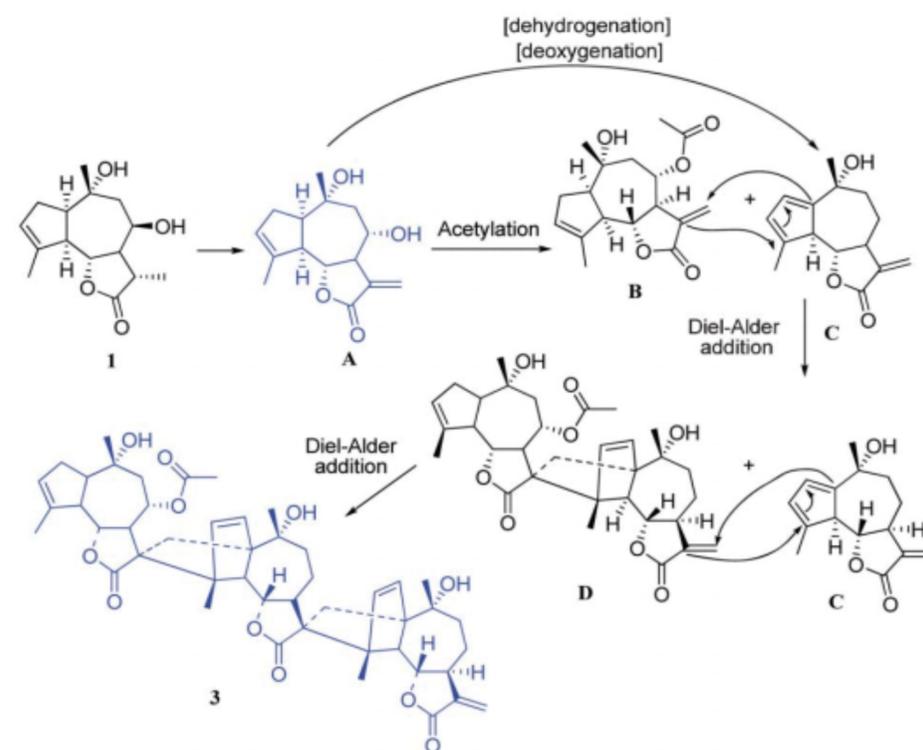
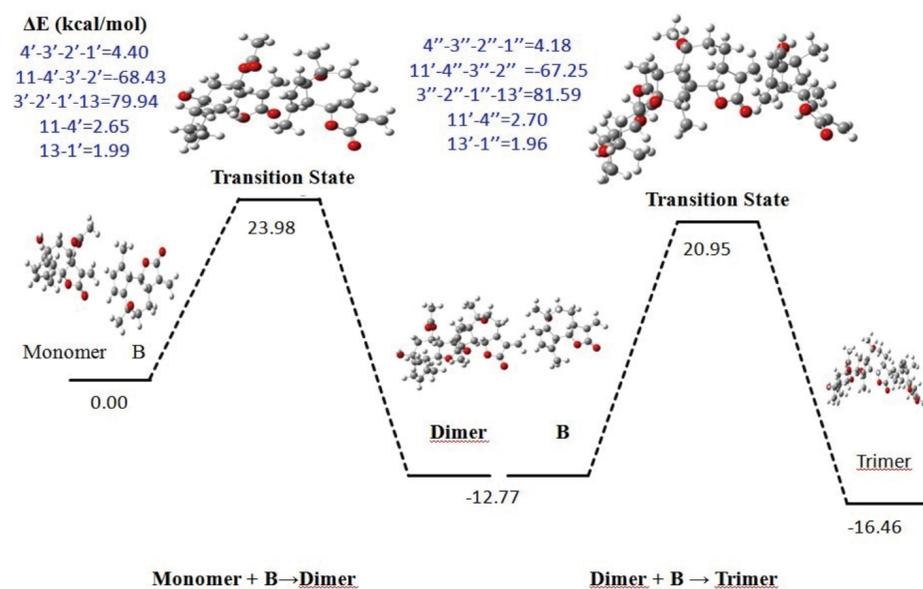
05

通过计算D-A反应的 反应过程推断天然产物的生源途径

在本案例中，通过实验获得了一个天然产物单体以其对应的二聚体和三聚体，确定该单体与其二聚体、三聚体之间的生源关系是本案例的研究重点。通过分析，认为三者可能通过D-A反应来进行聚合，因此，通过对D-A反应的计算，获得了该天然产物从单体到二聚体再到三聚体的全过程，并通过反应自由能曲线和反应态、过渡态以及产物态结构的确认将这个聚合过程完全地呈现了出来。分子间反应的计算有利于发现有机方法学上的新反应、新材料的制备等多个方面。

Reference

Chrysanolide A, an unprecedented sesquiterpenoid trimer from the flowers of *Chrysanthemum indicum* L. *RSC Adv.* 2013, 3(26), 10168–10172.





中大唯信
W E C O M P U T



微信公众号



微信客服

☎ 电话：400 920 4059

✉ 邮箱：info@wecomput.com

🌐 网址：www.wecomput.com