2015年6月17日/星期三 责任编辑/施淑洪 视觉设计/竹建英

为科学奏"凯"为创新争"先"

陈凯先院士自费购置电脑起步药物研发,填补多项国内空白



30年前, 很少有人能想象: 超 级计算机居然会有一天被用来"计 算"药物的作用并辅助药物设计,提 高新药研发的成功率。中国科学院 院士、药物化学家陈凯先就是当年 在我国率先开拓这一药物研发新领 域的团队中的重要一员——从 1988年法国留学归来开始,陈凯先 便与"计算机辅助药物设计研究"结 下了近30年的不解之缘。这一段缘 分,是一个学者甘坐冷板凳潜心研 究的寂寞岁月, 也是我国在该前沿 领域不断开拓发展的悠长时光。

而今, 计算机辅助药物设计已 成为我国创新药物研发的关键技术 之一。陈凯先说,鼓励原创性、引领性 研究,不能总是习惯于追逐热点,要有 耐得住寂寞、甘坐"冷板凳"的精神。

误打误撞 闯入化学领域

1945年8月,陈凯先出生于沙 坪坝重庆大学的校医院里, 随后随 家人移居上海。他的父亲为庆祝抗 战凯旋,为其取名为"凯先"。在中学 的各个科目中, 陈凯先其实最喜欢 物理,因此,在高考时,他毫不犹豫 地报考了复旦大学物理二系。1962 年秋天,17岁的他以优异成绩如愿



■ 陈凯先院士(左)与工作人员交谈

以偿被复日大学物理二系录取,却 "阴差阳错"被分到该系的放射化学 专业,从此"误打误撞"地进入了化 学新域。

陈凯先刻苦好学。1978年,国 家恢复了中断 12 年的研究生招生。 陈凯先考上了上海药物所的研究 生,遇到了"影响他一生的良师" -药物学家嵇汝运。

"新药的开发,长期依靠经验型 的猜测甚至是运气, 随机盲目地试 验筛选不仅时间长、费用大,效率也 低。随着计算机等现代技术的发展, 才让科学家们有可能通过计算和模 拟来设计和寻找药物。然而,在上世 纪70年代前,我国在这一新兴领域 的研究还基本上是一张白纸。"嵇汝 运先生是最早洞察这一动向的国内 科学家,他在花甲之年带领陈凯先 等年轻人啃起这块"硬骨头"。在嵇 汝运老师的支持下, 陈凯先去长春 向量子化学家唐敖庆先生学习,后 来又被选中去法国访学。

省吃俭用 自费购置电脑

1988年的春天,陈凯先从法国 访学归国。他不仅带回大量技术资 料和计算程序, 还给上海药物所带 回了一台他省吃俭用自费购置的计

算机。他和同事们一起搬运资料、安 装设备、移植调试带回的软件,建立 起基本的工作条件,以扎实的努力 推动药物设计研究领域的发展。

生物信息学等领域的讯谏发展 和计算机技术的不断进步, 为发现 和寻找新药提供了越来越强有力的 支撑。"计算机辅助新药研究"这个 曾经不被看好的"冷板登"也越来越 热。经过一代代科研人员的不断开 拓发展, 当年的崎岖小路已经越走 越宽,如今上海药物所药物设计和 发现中心已经成为药物设计领域中 国内领先、国际知名的研究集体。他 们在国内率先尝试应用超级计算 机,针对数十个药物作用靶点,开展 大规模"虚拟筛选",发现了一批针 对糖尿病、心脑血管疾病、肿瘤等严 重疾病的活性化合物和候选药物, 其中一些已经被确认为候选新药进 人后续研究阶段。他们还建立一整 套化合物成药性早期评价和预测方 法与相应软件,提前为研发中的新 药把好"风险关"。

1997年,陈凯先还担任上海药 物所所长的时候,就组织全所力量 积极向科技部申报建立"国家新药 筛选中心",该年5月我国首个"国 家新药筛选中心"成功挂牌。十多年 来,中心技术水平不断提升,已建成 了中国和亚洲最先进化合物样品 库,为国家药物研究的源头创新和 持续创新创造了有利的条件。

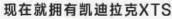
传承创新 让"老树开新花"

2005年,陈凯先卸任上海药物 所所长,又接到了新的任务——出 任上海中医药大学校长。"我国在 国际上有较大影响的新药研究成 果,大部分是以中药和天然药物为 基础研发成功的。但是,中药的创新 发展非常不易。"于是,上任后,陈凯 先沉下心逐个拜访学校的名老中 医,琢磨着如何让中医药这棵老树 焕发活力,"绽放新花"。

在担任中医药大学校长期间, 陈凯先组织和支持科研团队抓住 "肾精"与干细胞、"命火"与神经-内分泌-免疫网络之间的关系,提 出大胆的假设,采用现代药理学和 系统生物学的方法和技术, 取得了 具有重要价值的研究成果。为了推 动中医"四诊仪"的研究,陈凯先不仅 多次卦京与有关研究机构洽谈合作, 还亲自仔细编写修改申报材料。"四 诊仪"成功地承担和完成了我国参加 的国际航天合作项目一 -" 火星 500"计划的研究项目,采集参试人员 的证候信息并进行数据挖掘分析。

温良恭谦、和气待人,老同事们 都这样评价陈凯先。而年近七旬的 陈凯先至今仍干劲十足,每天奔波 在第一线。用同事们的话来说,他 对工作有点"顶真",最见不得敷衍 本报记者 马丹

给勇于开创的心 多一个启程的理由









创领移动互联科技 B英寸移动互联体被CUE屏 与世界互动尽在指尖



创新电子降堰技术 Bose环绕音响系统 静序纯净合度



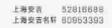
提升奢华境界 植配Ultra-View全景电动天像 坐栅广阔天地



定义全新安全标准 ESS提化安全無器II. 让自适应巡航与主动测车一路护航

首付仅18万 尾款秒杀 2个月零利率零月供

加迪拉克专业 800-820-1902 400-820-1902 www.codilloc.com.cn



上海永达 58786789 上海中联岛 52988888 上海东昌 68933888 永达申松 57708789 上海绿地 57635222 永达期期 83038789 上海百里 51022188