

浙江省科学技术奖公示信息表（单位提名）

提名奖项：自然科学奖

成果名称	新污染物代谢转化及多靶点毒性作用机制
提名等级	二等奖
提名书 相关内容	代表性论文目录: - Guangcai Ma, Haiying Yu, Ting Xu, Xiaoxuan Wei, Jianrong Chen, Hongjun Lin, Gerrit Schüürmann. Computational insight into the activation mechanism of carcinogenic <i>N'</i>-Nitrosonornicotine (NNN) catalyzed by cytochrome P450. <i>Environmental Science & Technology</i>, 2018, 52: 11838–11847. - Li Ji, Shujing Ji, Chenchen Wang, Kasper P. Kepp. Molecular mechanism of alternative P450-catalyzed metabolism of environmental phenolic endocrine-disrupting chemicals. <i>Environmental Science & Technology</i>, 2018, 52: 4422–4431. - Fangjie Guo, Lihong Chai, Shubin Zhang, Haiying Yu, Weiping Liu, Kasper P. Kepp, Li Ji. Computational biotransformation profile of emerging phenolic pollutants by cytochromes P450: Phenol-coupling mechanism. <i>Environmental Science & Technology</i>, 2020, 54: 2902–2912. - Lihong Chai, Huanni Zhang, Runqian Song, Haohan Yang, Haiying Yu, Piotr Paneth, Kasper P. Kepp, Miki Akamatsu, Li Ji. Precision biotransformation of emerging pollutants by human cytochrome P450 using computational–experimental synergy: A case study of tris(1,3-dichloro-2-propyl) phosphate. <i>Environmental Science & Technology</i>, 2021, 55: 14037–14050. - Haiying Yu, Dominik Wondrousch, Fei Li, Jianrong Chen, Hongjun Lin, Li Ji. <i>In silico</i> investigation of the thyroid hormone activity of hydroxylated polybrominated diphenyl ethers. <i>Chemical Research in Toxicology</i>, 2015, 28: 1538–1545. - Li Ji, Abayomi S. Faponle, Matthew G. Quesne, Mala A. Sainna, Jing Zhang, Alicja Franke, Devesh Kumar, Rudi van Eldik, Weiping Liu, Sam P. de Visser. Drug metabolism by cytochrome P450 enzymes: What distinguishes the pathways leading to substrate hydroxylation over desaturation? <i>Chemistry–A European Journal</i>, 2015, 21: 9083–9092. - Lingmin Jin, Haiying Yu, Liming Geng, Guangcai Ma, Xiaoxuan Wei. <i>In silico</i> study for inhibiting thyroid hormone sulfotransferase activity by halogenated phenolic chemicals. <i>Ecotoxicology and Environmental Safety</i>, 2019, 180: 146–151. - Guangcai Ma, Haiying Yu, Xiaoqin Xu, Liming Geng, Xiaoxuan

	Wei, Jiale Wen, Zhiguo Wang. Molecular basis for metabolic regioselectivity and mechanism of cytochrome P450s toward carcinogenic 4-(methylnitrosamino)-(3-pyridyl)-1-butanone. <i>Chemical Research in Toxicology</i>, 2020, 33: 436–447. 专利目录: 1. 于海瀛, 耿利鸣, 尉小旋. 一种快速预测羟基多溴联苯醚解离常数的方法. 专利号: ZL201711173682.6, 授权公告日: 2021.10.08. 2. 于海瀛, 陈伟, 郭婷. 基于分子结构预测有机化合物的牛血清白蛋白-水分配系数的方法及模型建立方法. 专利号: ZL201410251455.0, 授权公告日: 2017.06.06.
主要完成人	于海瀛, 排名 1, 教授, 浙江师范大学 季力, 排名 2, 教授, 中国矿业大学 马广才, 排名 3, 副教授, 浙江师范大学 郭芳婕, 排名 4, 讲师, 浙江工商大学 尉小旋, 排名 5, 副教授, 浙江师范大学
主要完成单位	浙江师范大学、浙江大学、中国矿业大学
提名单位	浙江省教育厅
提名意见	新污染物暴露引发的健康问题已成为全球环境与健康领域的重大科学挑战。针对新污染物代谢路径复杂、毒性效应多样等关键科学问题, 该项目团队在国家及浙江省自然科学基金等项目持续支持下, 深入开展了新污染物的代谢转化及毒性作用机制研究, 取得了一系列重要创新成果: 1) 发展了精准解析新污染物代谢机制的计算-实验协同策略, 为复杂环境污染物的代谢归趋研究提供了方法学突破; 2) 发现了 P450 酶代谢引发新污染物毒性增强的新途径, 为理解 P450 酶调控污染物毒性效应提供了理论依据; 3) 揭示了新污染物及代谢物的多途径、多靶点毒性作用机制, 为其健康风险评估提供了理论支撑及高效预测工具。以上研究成果深入揭示了新污染物代谢转化

	-毒性作用的关键关联机制，为其健康风险评估提供了坚实的理论依据、数据支撑和技术工具，有力推动并引领了相关研究领域的发展，得到了国内外同行的高度关注和正面评价。 提名该成果为省自然科学奖 二 等奖。
--	--