



尤禎祥 教授

生物資訊及系統生物研究所  
 電話：03-5712121 轉 (O) 56962 (Lab) 56964  
 E-mail：jsyu@nycu.edu.tw  
 實驗室：計算化學研究室  
 實驗室網頁：http://wild.life.nctu.edu.tw/~jsyu/

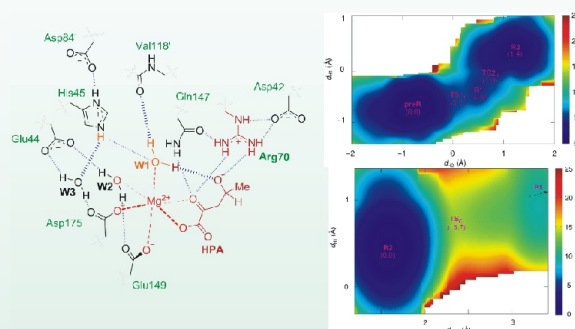


## 研究興趣

本實驗室利用各種計算化學方法，如全初始理論(ab initio methods)、密度泛函理論(density functional theory)、半經驗理論(semi-empirical methods)以及分子力學(molecular mechanics)等，探討1) 蛋白質構形與相關生化反應的理論性質，2) 有機或無機小分子反應路徑及理論性質，以及3) 過渡金屬配位化合物的多重鍵結性質與反應途徑，及配位化學在蛋白質研究上之應用。近期實驗室研究成果概述如下：

### • 金屬氫氧化物及精胺酸於丙酮酸醛醇縮酶之催化角色

利用後設分子動態學(well-tempered metadynamics)結合密度泛函理論及分子力學，探討結合金屬氫氧化物(metal-bound hydroxide)及精胺酸(arginine)於丙酮酸醛醇縮酶(pyruvate aldolase)之反應機制。理論計算證實反應途徑中質子轉移步驟能障較低，且轉移前後為平衡狀態(equilibrium)。反應途徑中之碳-碳鍵斷裂步驟能障最高，為速率決定步驟。



### • 氮-雜環卡賓催化安息香縮合反應之反應機制

利用密度泛函理論及多組態(multiconfiguration)波函數理論，探討氮-雜環卡賓(N-heterocyclic carbene)催化之安息香縮合反應(benzoin condensation)之自由基(radical)相關反應路徑。證實布里斯洛中間體(Breslow intermediate)為自由基之前驅物，且其反應能障大於非自由基參與之反應路徑。因此推論實驗觀測到之自由基是為去除反應副產物，使其重新進入催化路徑，再以非自由基路徑形成產物。

