

(12) 按照专利合作条约所公布的国际申请

(19) 世界知识产权组织
国际局



(10) 国际公布号

WO 2020/207150 A1

(43) 国际公布日
2020 年 10 月 15 日 (15.10.2020)

(51) 国际专利分类号:

B01J 19/00 (2006.01) G01N 5/00 (2006.01)
C08F 8/12 (2006.01) A01N 1/02 (2006.01)
G01N 13/00 (2006.01)

(71) 申请人: 中国科学院化学研究所 (INSTITUTE OF CHEMISTRY, CHINESE ACADEMY OF SCIENCES) [CN/CN]; 中国北京市海淀区中关村北一街2号, Beijing 100190 (CN)。北京大学第三医院 (北京大学第三临床医学院) (PEKING UNIVERSITY THIRD HOSPITAL) [CN/CN]; 中国北京市海淀区花园北路49号, Beijing 100191 (CN)。

(21) 国际申请号: PCT/CN2020/077472

(22) 国际申请日: 2020 年 3 月 2 日 (02.03.2020)

(25) 申请语言: 中文

(26) 公布语言: 中文

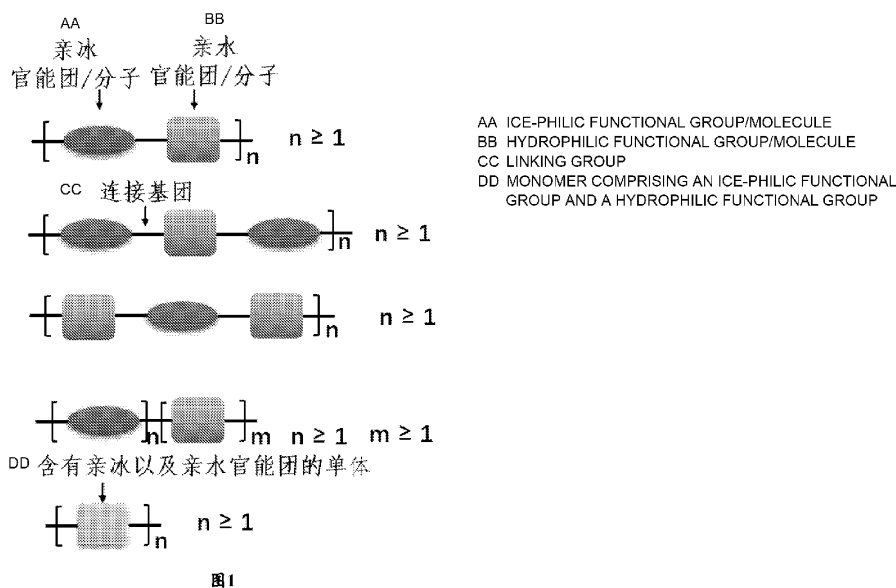
(30) 优先权:

201910282418.9	2019年4月9日 (09.04.2019)	CN
201910282422.5	2019年4月9日 (09.04.2019)	CN
201910282417.4	2019年4月9日 (09.04.2019)	CN
201910282416.X	2019年4月9日 (09.04.2019)	CN
201910281986.7	2019年4月9日 (09.04.2019)	CN

(72) 发明人: 王健君 (WANG, Jianjun); 中国北京市海淀区中关村北一街2号, Beijing 100190 (CN)。金晟琳 (JIN, Shenglin); 中国北京市海淀区中关村北一街2号, Beijing 100190 (CN)。吕健勇 (LV, Jianyong); 中国北京市海淀区中关村北一街2号, Beijing 100190 (CN)。严杰 (YAN, Jie); 中国北京市海淀区花园北路49号, Beijing 100191 (CN)。乔杰 (QIAO, Jie); 中国北京市海淀区花园北路49号, Beijing 100191 (CN)。闫丽盈 (YAN, Liying);

(54) Title: BIOMIMETIC ICE-INHIBITING MATERIAL AND CRYOPRESERVATION LIQUID CONTAINING SAME

(54) 发明名称: 一种仿生控冰材料及含有该仿生控冰材料的冷冻保存液



(57) Abstract: Provided is a biomimetic ice-inhibiting material. A library of structures of compound molecules is constructed, wherein the compound molecule comprises a hydrophilic group and an ice-philic group. Next, spreading performance of each compound molecule at an ice-water interface is evaluated by means of molecular dynamics simulation (MD simulation). Finally, a compound molecule having the desired ice affinity and water affinity is selected by means of screening. The present application proposes for the first time a mechanism of ice-philicity and hydrophilicity of an ice-inhibiting material, applies MD simulation for the molecular

[见续页]

中国北京市海淀区花园北路49号, Beijing 100191 (CN)。 李蓉 (LI, Rong); 中国北京市海淀区花园北路49号, Beijing 100191 (CN)。

(74) 代理人: 北京知元同创知识产权代理事务所 (普通合伙) (BEIJING ORIGINTELLIGENCE IP LAW FIRM); 中国北京市海淀区上地三街9号嘉华大厦E座1004室黄越; 焦健, Beijing 100085 (CN)。

(81) 指定国 (除另有指明, 要求每一种可提供的国家保护): AE, AG, AL, AM, AO, AT, AU, AZ, BA, BB, BG, BH, BN, BR, BW, BY, BZ, CA, CH, CL, CN, CO, CR, CU, CZ, DE, DJ, DK, DM, DO, DZ, EC, EE, EG, ES, FI, GB, GD, GE, GH, GM, GT, HN, HR, HU, ID, IL, IN, IR, IS, JO, JP, KE, KG, KH, KN, KP, KR, KW, KZ, LA, LC, LK, LR, LS, LU, LY, MA, MD, ME, MG, MK, MN, MW, MX, MY, MZ, NA, NG, NI, NO, NZ, OM, PA, PE, PG, PH, PL, PT, QA, RO, RS, RU, RW, SA, SC, SD, SE, SG, SK, SL, ST, SV, SY, TH, TJ, TM, TN, TR, TT, TZ, UA, UG, US, UZ, VC, VN, WS, ZA, ZM, ZW。

(84) 指定国 (除另有指明, 要求每一种可提供的地区保护): ARIPO (BW, GH, GM, KE, LR, LS, MW, MZ, NA, RW, SD, SL, ST, SZ, TZ, UG, ZM, ZW), 欧亚 (AM, AZ, BY, KG, KZ, RU, TJ, TM), 欧洲 (AL, AT, BE, BG, CH, CY, CZ, DE, DK, EE, ES, FI, FR, GB, GR, HR, HU, IE, IS, IT, LT, LU, LV, MC, MK, MT, NL, NO, PL, PT, RO, RS, SE, SI, SK, SM, TR), OAPI (BF, BJ, CF, CG, CI, CM, GA, GN, GQ, GW, KM, ML, MR, NE, SN, TD, TG)。

本国际公布:

— 包括国际检索报告 (条约第21条(3))。

structure design of the ice-inhibiting material, evaluates the ice-phility and the hydrophilicity of the designed ice-inhibiting material by means of MD simulation, predicts ice inhibition performance of the ice-inhibiting material, and optimizes the structure thereof. The biomimetic ice-inhibiting material designed and selected by the method greatly inhibits the growth of ice crystals. When added to a cryopreservation reagent, the biomimetic ice-inhibiting material achieves a good cryopreservation effect even without DMSO.

(57) 摘要: 提供了一种仿生控冰材料, 通过构建化合物分子结构库, 所述化合物分子含有亲水基团和亲冰基团; 采用分子动力学模拟(MD模拟)评估各化合物分子在冰水两相界面的铺展性能; 筛选出所需冰亲和性和水亲和性的化合物分子。首次提出控冰材料亲冰性和亲水性的机制, 将MD模拟引入到控冰材料的分子结构设计中, 通过分子动力学模拟评估所设计的控冰材料的冰亲和性和水亲和性, 预测控冰材料的控冰性能, 并可实现结构优化。所述的方法设计和筛选的仿生控冰材料有良好的抑制冰晶生长的能力, 其用于冷冻保存试剂时, 即便不加DMSO也可以达到良好的冷冻保存效果。