

《蛋白质模拟》

图书基本信息

书名：《蛋白质模拟》

13位ISBN编号：9787030473272

出版时间：2016-3-1

作者：王存新

页数：421

版权说明：本站所提供下载的PDF图书仅提供预览和简介以及在线试读，请支持正版图书。

更多资源请访问：www.tushu000.com

《蛋白质模拟》

作者简介

王存新，1943年11月生，教授，博士生导师。1968年毕业于中国科学技术大学，1978~1998年在中国科大任教，1998年作为学术带头人调入北京工业大学工作。曾赴美国、法国、意大利从事合作研究多年。主要从事蛋白质模拟和药物设计研究。主持完成国家及省部级科研项目20余项，培养硕士、博士研究生50余人，在国内外学术期刊上发表论文200余篇，出版专著2部、译著1部，获国家发明专利10余项。曾获国家自然科学奖三等奖、中国科学院自然科学奖二等奖、国务院颁发的政府特殊津贴、北京市突出贡献专家、北京市优秀教师、北京市教学名师等多项奖励和荣誉称号。

书籍目录

目录

第一部分分子动力学模拟方法

第1章分子动力学模拟的原理、方法与进展

1.1引言

1.2生物大分子的经典力学模型与常见力场

1.2.1经典力学模型

1.2.2常见分子力场

1.3积分算法

1.3.1体系的动力学方程

1.3.2动力学方程的数值解法

1.4周期性边界条件

1.5约束条件动力学模拟

1.5.1SHAKE算法

1.5.2LINCS算法

1.6非键相互作用

1.6.1短程相互作用

1.6.2MD模拟中长程静电相互作用的常用算法

1.7恒温恒压分子动力学模拟

1.7.1温度控制方法

1.7.2压力控制方法

1.8溶剂模型

1.8.1隐含溶剂模型

1.8.2显含溶剂模型

1.9分子动力学模拟的主要步骤

1.10蛋白质分子动力学模拟的进展与前景

参考文献

第2章拉伸分子动力学模拟

2.1引言

2.2拉伸分子动力学模拟方法

2.3拉伸分子动力学模拟实例

2.3.1周质结合蛋白与配体相互识别研究

2.3.2抗癌多肽p28与肿瘤抑制蛋白p53的拉伸分子动力学研究

参考文献

第3章膜蛋白体系的分子动力学模拟

3.1引言

3.2膜蛋白分子动力学模拟研究进展

3.2.1膜的性质和脂质分子的类型

3.2.2膜蛋白的性质和类型

3.2.3分子动力学模拟在膜研究方面的应用

3.2.4分子动力学模拟在膜蛋白体系的应用

3.3膜蛋白体系分子动力学模拟的基本方法和步骤

3.4BtuC—POPC膜蛋白体系的分子动力学模拟

3.4.1研究背景

3.4.2材料和方法

3.4.3结果和讨论

3.4.4总结和展望

参考文献

第4章蛋白质与DNA相互作用的分子动力学模拟

4.1引言

4.2蛋白质与DNA识别的结构特征

4.2.1 DNA结合蛋白的结构特征

4.2.2 蛋白质—DNA复合物的作用位点特征

4.3蛋白质—DNA识别的研究方法

4.3.1 蛋白质与DNA的相互作用模式

4.3.2 蛋白质—DNA相互作用的实验方法

4.3.3 蛋白质—DNA识别研究的分子模拟方法

4.4 HIV—1整合酶与病毒DNA识别的分子动力学模拟

4.4.1 研究背景及意义

4.4.2 体系和方法

4.4.3 结果和讨论

4.5小结

参考文献

第二部分蛋白质复合物结构预测

第5章用分子对接方法预测蛋白质复合物结构

5.1引言

5.2蛋白质—蛋白质分子对接方法

5.2.1 分子对接的基本原理

5.2.2 分子对接的关键步骤

5.3分子对接方法的研究现状

5.3.1 分子对接方法的分类

5.3.2 几种重要的分子对接方法

5.3.3 国际CAPRI蛋白质复合物结构预测简介

5.4难点和亟待解决的问题

参考文献

第6章蛋白质结合位点预测

6.1引言

6.2蛋白质结合位点的分类

6.2.1 结合位点上的热点残基

6.2.2 锚残基结合位点

6.2.3 模块结合位点

6.3常见的蛋白质结合位点预测方法

6.3.1 基于序列的预测方法

6.3.2 基于结构的预测方法

6.3.3 基于理化性质的预测方法

6.4蛋白质结合位点预测实例

6.4.1 基于主链氢键包埋的预测方法

6.4.2 基于蛋白质表面氨基酸模块内部接触和外部暴露的预测方法 (PAMA)

6.5展望

参考文献

第7章蛋白质分子对接打分函数设计

7.1引言

7.2经典打分参量

7.2.1 几何互补项

7.2.2 界面接触面积

7.2.3 范德华与静电相互作用

7.2.4 统计成对偏好势

7.3常用蛋白质分子对接软件中打分函数的设计

7.3.1ZDOCK打分函数

7.3.2RosettaDock打分函数

7.3.3HADDOCK打分函数

7.4打分函数设计实例

7.4.1基于蛋白质类型的组合打分函数

7.4.2基于结合位点信息的打分函数

7.4.3基于网络参量的打分函数

7.5展望

参考文献

第三部分用分子模拟方法研究蛋白质折叠

第8章蛋白质折叠研究简介

8.1蛋白质折叠的研究背景与意义

8.2蛋白质折叠的计算机模拟研究

8.2.1基于知识的蛋白质结构预测

8.2.2蛋白质从头折叠研究

参考文献

第9章用复杂网络方法研究蛋白质折叠

9.1复杂网络模型简介

9.1.1引言

9.1.2复杂网络的概念

9.1.3复杂网络的特征

9.1.4复杂网络在生命科学研究中的应用

9.2氨基酸网络模型及其在蛋白质折叠研究中的应用

9.2.1氨基酸网络的统计特性及其与蛋白质折叠的关系

9.2.2蛋白质去折叠路径上氨基酸网络特征量分析

9.3构象网络模型及其在蛋白质折叠研究中的应用

参考文献

第10章蛋白质折叠路径与折叠核预测

10.1蛋白质折叠路径研究

10.1.1Levinthal悖论与折叠漏斗

10.1.2蛋白质折叠机制模型

10.1.3蛋白质折叠路径的计算机模拟

10.2蛋白质折叠核的识别研究

10.2.1蛋白质两态折叠及过渡态的识别

10.2.2蛋白质折叠核的预测方法

参考文献

第11章用相对熵方法研究蛋白质折叠

11.1相对熵原理与方法

11.1.1引言

11.1.2基本理论与方法

11.2基于相对熵方法的蛋白质折叠研究

11.2.1接触势的选取

11.2.2接触强度的选取

11.2.3接触势系综平均值的计算

11.3模拟结果与讨论

11.4小结

参考文献

……

《蛋白质模拟》

第四部分关于粗粒化模型

第五部分关于长程静电相互作用

第六部分药物分子设计方法与应用

中英文对照术语表

《蛋白质模拟》

版权说明

本站所提供下载的PDF图书仅提供预览和简介，请支持正版图书。

更多资源请访问:www.tushu000.com