

《蛋白质模拟的多尺度方法》

书籍信息

版次：31

页数：

字数：

印刷时间：2014年02月01日

开本：16

纸张：胶版纸

包装：平装

是否套装：否

国际标准书号ISBN：9787030396495

丛书名：新生物学丛书

编辑推荐

2013年诺贝尔化学奖10月9日在瑞典揭晓，美国科学家马丁·卡普拉斯（Martin Karplus）、迈克尔·莱维特（Michael Levitt）及亚利耶·瓦谢尔（Arieh Warshel）因给复杂化学体系设计了多尺度模型而共享此奖项。《蛋白质模拟的多尺度方法》中许多内容与他们的研究成果密切相关。我们也衷心地希望此次诺奖的授予可以使蛋白质模拟的多尺度方法技术在中国获得更广泛的关注与更长足的发展！

内容简介

《蛋白质模拟的多尺度方法》涉及蛋白质分子模拟领域内最新的综述和通用方法，学术思想新颖，内容包括蛋白质结构预测方法、蛋白质动力学、蛋白质折叠机理及生物大分子相互作用等方面的理论和应用，涵盖了各种不同的采样技术、粗粒化模型、分子对接方法的原理与方法，以及在分子设计与药物设计等生物物理学与生物医学方面的应用等十分广阔的范围。《蛋白质模拟的多尺度方法》各章的作者都是目前该领域的知名专家学者。

目录

作者通讯地址

《新生物学丛书》丛书序

译者序

前言

第1章 格子聚合物和蛋白质模型

1.1 链分子的简化模型

1.2 简单的格子聚合物

1.3 具有类蛋白质性质的简单格子聚合物

1.4 最小类蛋白质模型

1.5 高协调格子蛋白模型

1.6 应用格子模型的蛋白质折叠和结构预测

参考文献

第2章 蛋白质和多肽的多尺度对接

2.1 引言 作者通讯地址《新生物学丛书》丛书序译者序前言第1章

格子聚合物和蛋白质模型 1.1 链分子的简化模型 1.2 简单的格子聚合物 1.3

具有类蛋白质性质的简单格子聚合物 1.4 最小类蛋白质模型 1.5

高协调格子蛋白模型	1.6	应用格子模型的蛋白质折叠和结构预测	参考文献	第2章					
蛋白质和多肽的多尺度对接	2.1	引言	2.2	刚性对接程序	2.3	柔性对接	2.4		
CABS多尺度柔性对接	2.4.1	柔性处理	2.4.2	多肽对接到受体蛋白的示例					
2.4.3	蛋白质-蛋白质对接	2.5	展望	参考文献	第3章				
蛋白质粗粒化模型：理论与应用	3.1	引言	3.2	蛋白质粗粒化模型的发展史	3.3				
构象空间表示方式的选择	3.4	相互作用设计形式	3.5	粗粒化力场的获得	3.5.1				
基本公式	3.5.2	统计势（玻耳兹曼原理）	3.5.3	PMF、的因子展开	3.5.4				
力匹配方法	3.5.5	有效能量函数的优化	3.5.6						
“基于知识”和“基于物理”的势能	3.6	粗粒化模型在蛋白质结构预测中的应用							
3.7	粗粒化模型在研究蛋白质动力学和热力学中的应用	3.8	结论与展望	参考文献					
第4章	基于原子模型和粗粒化模型的结构预测与优化中的构象采样	4.1	引言	4.2					
迭代结构优化框架	4.2.1	采样效率的定量度量	4.3	不同分辨率的蛋白质模型					
4.3.1	蛋白质的全原子模型	4.3.2	蛋白质的粗粒化模型	4.4					
采样不同蛋白质模型进行迭代优化	4.4.1	采样方法	4.4.2						
向天然态的精细优化	4.5	结论与展望	参考文献	第5章	蛋白质的有效全原子势				
5.1	引言	5.2	有效势	5.3	应用	5.3.1	折叠热力学	5.3.2	机械去折叠
5.3.3	聚集性	5.4	结论	参考文献	第6章				
蛋白质粗粒化模拟中的统计接触势：从两体到多体势	6.1	引言	6.2						
基于知识的势函数的发展历史	6.2.1	逆玻耳兹曼关系	6.2.2	准化学近似	6.3				
距离无关的势函数	6.3.1	采样权重	6.4	距离相关的势函数	6.5	几何势函数			
6.6	多体势	6.6.1	四体接触势	6.6.2	四体接触势的能量方程	6.7			
优化方法	6.8	蛋白质统计接触势与理想的氨基酸相互作用模式的比较分析	6.9						
蛋白质粗粒化模型的统计力场	6.10	基于知识势函数的应用	6.11	未来发展趋势					
参考文献第7章	蛋白质集合运动的全原子描述和粗粒化描述之间的关联	7.1	引言						
7.2	蛋白质在不同时间尺度的内在动力学：研究方法	7.2.1	低能的集体激发						
7.2.2	结构子态	7.2.3	子态之间及子态内部的涨落	7.2.4					
不同子态的结构涨落之间的比较	7.2.5	蛋白质动力学的粗粒化描述及模拟	7.3						
不同时间尺度上的蛋白质内在动力学：以腺苷酸激酶为例	7.3.1								
在一个近乎平坦的自由能曲面下的构象涨落：以TAT为例	7.4	结论	参考文献	第8章					
基于结构的生物分子模型：蛋白质拉伸、结节动力学、流体动力学效应及病毒衣壳刻痕	8.1	引言	8.2	基于结构的蛋白质模型	8.3	基于结构的DNA和树状分子模型			
8.4	基于结构的蛋白模型应用举例	8.4.1	17 134个蛋白质的机械强度	8.4.2					
结的动力学	8.4.3	膜蛋白	8.4.4	流体动力学相互作用	8.4.5				
病毒衣壳的纳米压痕	参考文献	第9章	蛋白质能量地貌采样——有效算法探索	9.1					
引言	9.2	基本的模拟技术	9.2.1	分子动力学模拟	9.2.2	蒙特卡洛模拟			
9.2.3	优化技术	9.3	先进的模拟技术	9.3.1	去折叠模拟	9.3.2			
先进的更新方法	9.3.3	广义系综技术	9.4	最近的应用	9.5	结论	参考文献		
第10章	蛋白质结构预测：从已知结构识别匹配到片段重组	10.1	引言	10.2					
蛋白质结构预测方法：分类与关键评价	10.3								
基于模板的蛋白质结构预测的“元”方法	10.4	从多模板模型到杂合模型	10.5						
片段组装：从头蛋白质结构预测方法的新趋势	10.5.1								
基于片段组装的从头预测（及随后的结构优化）	10.5.2								

包含片段组装和折叠模拟的混合方法	10.5.3
其他基于模板预测的蛋白质结构预测方法	10.6
为什么片段组装方法能如此成功	
10.7 结论与展望	参考文献
第11章 基因组水平的蛋白质结构预测	11.1 引言
11.2 基因组水平蛋白质结构预测领域的最前沿研究	11.3 TASSER方法
11.4 I—TASSER方法	11.5 用TASSER / I—TASSER进行大规模结构预测测试
	11.6
大肠杆菌基因组中中等大小ORF的结构预测	11.7
人类基因组中的全部907个推定GPCR的结构预测	11.8
I—TASSER方法应用于沙眼衣原体基因组	11.9 结论
	参考文献
第12章	
蛋白质折叠动力学研究的多尺度方法	12.1 引言
	12.2
将实验与理论模拟相结合的结构动力学研究	12.3
基于高精度简化模型的蛋白质动力学研究	12.3.1
采用高精度从头模型的蛋白质折叠研究范例体系	12.4 结论
	参考文献
第13章	
基于模板的蛋白质结构模型的误差估计	13.1 引言
	13.2 质量评价方法的概述
13.2.1 基于物理学的打分	13.2.2 基于知识的势
	13.2.3 评价比对质量
	13.3
SPAD分值	13.3.1 SPAD分值的定义
	13.3.2 SPAD与模型RMSD的相关性
13.3.3 与模型局部质量的相关性	13.4 结构模型的真实值质量评价
	13.4.1
Tondel方法	13.4.2 ProQ
	13.4.3 TVSMod
	13.4.4 SubAqua方法
	13.5
结论	参考文献
第14章 蛋白质结构预测评价方法：问题与对策	14.1 引言
	14.2
模型质量的数值计算	14.3 成功策略的鉴定
	14.4 认识蛋白质结构预测的进展
14.5 模型质量的先验评价	14.6 蛋白质模型在生物医学研究中的应用
	14.7
结论与展望	参考文献
	术语表
	彩图

[显示全部信息](#)

在线试读部分章节

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.tushupdf.com](http://www.tushupdf.com)