基于受体的药物设计

- 1. 同源模建
  - 蛋白质结构获取方法
  - PDB蛋白质结构的选择标准
  - 二级结构和二级结构的预测
  - 三维结构的预测
    - 同源模建-比较模建
    - 从头构建
    - 穿线方法
  - 蛋白质的同源模建
    - 基本假设
    - 步骤
    - 模板的选择
    - 序列比对
    - 结构模建
    - 结构精修
    - 结果评价
  - 序列相似性比较
  - 药物成靶性的评价
- 2. 活性位点分析(略)
- 3. 分子对接
  - 分子对接及其应用
  - 分子对接的流程
    - ① 受体、配体结构的准备；
    - ② 配体构象生成；
    - ③ 结合模式搜索；
    - ④ 最终打分；
    - ⑤ 对接结果的分析与处理；
  - 数据准备
    - 备筛数据库的选择和准备
    - 蛋白质结构的预处理和常见的氨基酸类型
  - 结合构象的搜寻
    - 形状匹配和禁忌搜索
    - 随机搜索
    - 生长构建
    - 多构象搜寻
    - Grid预处理(提高速度)
    - 蛋白质柔性的处理：列举、优化、软对接
  - 打分方法
    - 基于力场的打分
    - 基于经验的打分
    - 基于知识的打分
    - 其它
  - 罚分方法
    - 碰撞
    - 超出活性位点
    - 配基效率
  - 对接后处理
    - 一致性打分
    - 化学评价
    - 目筛
  - 对接结果的评价
  - 常用的分子对接程序
  - 分子对接方法的讨论
- 4. Dock对接演示和练习
- 5. 分子动力学与结合能计算
- 6. 全新(从头)药物设计(略)
- 7. 基于受体结构的药效基团模型(略)
- 8. 实例介绍