

<<蛋白质结构预测实验指南>>

图书基本信息

书名：<<蛋白质结构预测实验指南>>

13位ISBN编号：9787122077554

10位ISBN编号：7122077551

出版时间：2010-4

出版单位：化学工业出版社

作者：岳俊杰，冯华，梁龙 主编

页数：127

字数：188000

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：<http://www.tushu007.com>

## &lt;&lt;蛋白质结构预测实验指南&gt;&gt;

## 前言

蛋白质是一切生物借以表现生命的最重要的基本单元，是自然界存在的小型自动机器。任何一个生命体的繁衍、新陈代谢、运动等，都需要数十亿个蛋白质分子的协调行动才能得以顺利进行。

随着人类功能基因组研究的展开，科学家对于基因的研究焦点，已由基因测序转移到基因表达产物——蛋白质上。

为了执行特定的生物功能，每一个蛋白质分子都有一个独特的三维结构。

研究蛋白质的结构，有助于了解蛋白质的功能，了解蛋白质的作用机制以及了解蛋白质与其他分子之间的相互作用。

对于全新或功能未知的蛋白质分子，通过结构分析，可以进行功能诠释，指导设计生物学实验来进行功能研究。

通过分析蛋白质的结构，确认功能位点，为设计新的蛋白质或改造蛋白质提供可靠的依据。

到目前为止，确定蛋白质三维结构的方法主要分为两大类，其一是利用实验的方法来测定；其二则是利用计算机技术，根据现有理论和已知的序列等信息进行蛋白质的结构预测。

测定蛋白质三维结构的方法分为三大类：（1）X射线晶体衍射图谱法，（2）核磁共振方法，（3）电镜方法。

近年来分子生物学的快速发展使蛋白质序列数据库的数据量得到快速增长。

而利用实验方法测定蛋白质三维结构则由于耗时长、成本高以及方法在技术上的困难，而使解析的蛋白质结构比已知的蛋白质序列要少得多。

另一方面，随着DNA测序技术的发展，人类基因组及更多的模式生物基因组将被完全测序，DNA序列数量将会急增，由于DNA序列分析技术和基因识别方法的进步，从DNA可以很方便地推导出大量的蛋白质序列。

这意味着已知序列的蛋白质数量和已测定结构的蛋白质数量的差距将会越来越大。

因此通过实验方法获得蛋白质三维结构越来越无法满足人们对蛋白质结构和功能关系研究的要求，迫切需要一种不依赖实验而又有一定准确性的获取蛋白质三维结构信息的手段，蛋白质结构预测在后基因组时代就显得格外重要。

目前国内外关于蛋白质结构预测的专著已有不少，但是大都偏重于理论方面。

对于从事生命科学与生物技术研究的广大科研工作者来说，需要的是实用性强、具有可操作性的技术类著作，而这方面的资料几乎是空白。

为了使在生物医学领域的科技人员及研究生能够循序渐进地掌握蛋白质结构预测的方法，我们组织了一批在一线从事相关工作的年轻博士出版了这本小册子。

主要向广大读者详细介绍蛋白质结构建模、蛋白质的分子对接、蛋白质-蛋白质相互作用的模拟、蛋白质结构的分子动力学模拟等操作。

每一种分析技术都选择两种软件，一是在业界声誉最好的商用软件，二是应用最普遍的免费软件。

计算分析的对象都是各位编者个人在实践工作中的具体的分析对象。

期望通过阅读本手册，可以使从事生命科学与生物技术研究的广大科研工作者能够掌握相关的技术要领，学会掌握这些方法，为他们的科研工作服务。

本书的第一章由岳俊杰撰写，第二章、第四章由岳俊杰、梁龙、李北平撰写，第三章由岳俊杰、冯华、徐涛撰写，第五章由冯华、刘明、田然、吕炜撰写，第六章由冯华、刘明、徐涛、吕炜撰写，第七章由冯华、田然、刘明、郝格非、刘健撰写。

编写过程得到了军事医学科学院生物工程研究所和创腾科技有限公司的大力协助，在此表示感谢。

## <<蛋白质结构预测实验指南>>

### 内容概要

蛋白质结构预测是一种不依赖晶体培养、迅速、简便的获得蛋白质结构的方法，对于分子生物学、蛋白质工程、药物设计等领域研究工作具有重要的意义。

本书涵盖了蛋白质结构预测的主流手段与方法，包括同源建模、折叠模式识别、分子对接、蛋白质—蛋白质复合物的结构模拟、分子结构模拟等，以蛋白质结构研究的具体操作和经典实例为素材，使得蛋白质结构预测不仅仅停留在理论阶段，让读者能够轻松地掌握蛋白质结构预测的应用技术。

本书可供从事蛋白质科学研究的研究生、高年级本科生及其他研究人员参考阅读。

## &lt;&lt;蛋白质结构预测实验指南&gt;&gt;

## 书籍目录

第一章 蛋白质结构概述 第一节 蛋白质的结构层次 一、一级结构 二、二级结构 三、三级结构(折叠模式) 四、四级结构 第二节 蛋白质结构的测定方法 一、X射线晶体学 二、核磁共振 三、结构分析的其他方法 第三节 蛋白质结构预测的意义 第二章 蛋白质二级结构预测 第一节 蛋白质二级结构预测概述 第二节 蛋白质二级结构预测实例 第三章 利用同源模建法预测蛋白质结构 第一节 同源模建的基本原理及基础 第二节 同源模建预测蛋白质结构的基本步骤 一、参考蛋白搜索 二、确定结构保守区 三、蛋白主链的模建 四、侧链安装 五、优化处理 六、合理性检测 第三节 利用SWISS-MODEL服务器进行蛋白质结构同源模建操作实例 一、登录服务器,输入目标序列 二、模建结果与分析 第四节 利用Discovery Studio结构模拟系统进行同源模建操作实例 一、识别模板,比对模板 二、将模板进行比对 三、将目标序列与模板比对 四、使用MODELER构建目标序列的D模型 五、模型评估 第四章 利用折叠模式识别法预测蛋白质结构 第一节 折叠模式识别法的基本原理 第二节 折叠模式识别法预测蛋白质结构的操作实例 一、程序的安装 二、Threader程序的运行 三、结果分析 四、过滤假阳性结果 第五章 蛋白质分子对接技术 第一节 蛋白质分子对接概述 第二节 利用LibDock进行分子对接的基本操作方法及实例 一、准备分子对接体系,执行分子对接计算 二、分析对接结果 第三节 利用Flexible Docking进行受体和配体柔性的分子对接实例 一、准备对接的分子体系,完成分子对接计算 二、分析配体对接结果 第四节 利用AutoDock程序进行分子对接的操作及研究实例 一、AutoDock的安装 二、AutoDock的基本应用 三、实例分析 第六章 蛋白质-蛋白质复合物的结构模拟 第一节 蛋白质与蛋白质对接的意义 第二节 利用ZDOCK来研究蛋白质-蛋白质的对接 一、设定一次ZDOCK计算 二、分析ZDOCK结果 三、利用RDOCK优化对接构型 四、使用RMSD分析结合界面的氨基酸 第三节 利用Hex研究大分子与大分子之间的相互作用 一、Hex的安装 二、Hex的基本应用 三、对接实例 第七章 蛋白质结构的分子动力学模拟 第一节 蛋白质分子动力学模拟概述 第二节 Discovery Studio平台中分子动力学操作实例 一、准备分子动力学体系,执行分子动力学计算 二、分析分子动力学计算结果 第三节 利用NAMD进行分子动力学计算的操作及研究实例 一、NAMD简介 二、NAMD程序的安装与使用 三、构建模型 四、分子动力学模拟 五、可视化与数据处理 第四节 利用GROMACS进行分子动力学模拟操作 一、GROMACS介绍 二、GROMACS的下载及安装 三、GROMACS的基本操作 本书主要参考文献 附录 部分蛋白质结构预测相关的网上资源

## &lt;&lt;蛋白质结构预测实验指南&gt;&gt;

## 章节摘录

第三节 蛋白质结构预测的意义 尽管解析蛋白质结构的技术已经取得了非常重大的进展，获得了大量的蛋白质结构，但解析蛋白质结构依然是一个劳动密集型和花费昂贵的过程，而且目前各种实验方法都存在缺陷或限制。

x射线单晶衍射最大的缺点是要测定的蛋白质必须能够形成晶体，而许多蛋白质不能结晶，这就限制了测定的范围。

核磁共振方法虽然不需培养蛋白质晶体，但需要蛋白质能够在较高浓度下可溶、稳定、不聚集或变性，更重要的是，核磁共振技术对于较大的蛋白质分子的结构还无能为力。

电镜三维重构需要培养二维晶体，而且目前测定的结构的分辨率还不够高，还没有成为测定蛋白质结构的常规方法。

蛋白质空间结构的测定速度还远远赶不上蛋白质序列增长的速度，并且随着基因组测序的进行，二者差距有越来越大的趋势。

截止2009年10月，已知序列的蛋白质已超过100万，而已知结构的蛋白质仅有6万多。

因此蛋白质结构预测成了目前了解蛋白质结构信息的一个非常有效的实际手段。

随着基因组和蛋白质组计划的研究进展，大量的具有特殊功能的蛋白质将被发现，对蛋白质空间结构预测的要求也越来越迫切。

除了获得蛋白质结构信息之外，蛋白质结构预测还有重大的理论意义。

生命遗传信息存储传递及表达的认识是20世纪生物学所取得的最重要的突破，其中的关键问题是由3个相连的核苷酸顺序决定蛋白质分子肽链中的1个氨基酸，即“三联遗传密码”（“第一遗传密码”）的破译。

蛋白质必须有特定的三维空间结构，才能表现其特定的生物学功能。

20世纪60年代Anfinsen就提出蛋白质分子的一级序列决定其空间结构的论断，这一论断得到多次实验证实并被人们广泛接收，大量实验充分说明蛋白质的氨基酸顺序与其空间结构之间存在着确定的关系。

国际上将蛋白质的氨基酸顺序与其空间结构的对应关系称之为“第二遗传密码”。

但是直到现在，“第二遗传密码”依然没有得到破译，这个问题是蛋白质研究最后几个尚未揭示的奥秘之一。

蛋白质结构预测实际上是去从理论上最直接地解决蛋白质的折叠问题，即破译“第二遗传密码”。

近年来随着结构生物学的发展，解析的蛋白质结构越来越多，这就为研究和总结蛋白质结构的规律打下了很好的基础，也为蛋白质的结构预测提供了参考。

另外计算机科学与技术的快速进步也大大地促进了蛋白质结构预测的发展。

蛋白质结构预测问题虽然还没有最终解决，但是已经取得了一些令人欣喜的成就。

目前，蛋白质空间结构预测的方法有3种。

<<蛋白质结构预测实验指南>>

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:<http://www.tushu007.com>