武汉物数所理论交叉学术交流系列报告

(第一六三期)

DOX 预测生物大分子与配体结合构象研究的新进展

万坚 教授

华中师范大学 化学学院

2017年03月22日(周三)

上午10:00-11:30

波谱楼（旧楼）二楼会议室

Abstract:理论研究生物大分子基态和激发态的性质与功能的前提条件是要获得准确的生物大分子与配体分子的结合构象。在没有获得实验结构数据的情况下，如何计算获得准确的生物大分子与配体分子的结合构象信息（几何构型参数）是该研究领域亟待解决的科学问题之一。对于复杂的蛋白-配体分子体系而言，准确计算预测合理的低能构象主要取决于能否实现全局复杂势能面的搜索和局域低能构象的高精度优化。我们基于BC-SAMP策略进行蛋白-配体结合构象搜索及其低能构象优化的计算方法与测试研究，发展得到一种能够准确计算预测蛋白-配体结合构象的DOX新方法。该方法不仅能为高精度理论计算研究配体参与的生物大分子性质与功能的分子机理“提供”可靠的结构信息，而且还能为计算机辅助药物设计研究提供一个现实可行的“精研”策略与方法。以测试集中的蛋白-配体复合物晶体结构和能量为标准，DOX复合计算方法在“自对接”模式下给出的蛋白-配体结构构象预测精度目标为RMSD平均值小于1.0 Å，“相对结合能”的误差平均值为2.0 kcal/mol。

报告人简介：万坚，华中师范大学化学学院教授，博士生导师。2000年10月，获日本京都大学工学博士学位、2001年6月，获华中师范大学理学博士学位，2002年6月至2003年8月，在加拿大约克大学从事博士后研究。获教育部新世纪优秀人才，明德教师，桂苑名师等荣誉。主要从事发展和运用现代分子模拟方法，结合分子生物学、仪器分析以及有机合成等技术研究生物大分子复合物的结构、功能及其调控。已发表SCI论文60余篇，研究成果获湖北省自然科学奖一等奖，教育部高等学校自然科学奖一等奖。

主办单位:武汉物数所理论与交叉研究部