



# 学术报告

**报告题目：趋近于实验精度的蛋白-配体结合自由能的理论计算预测**

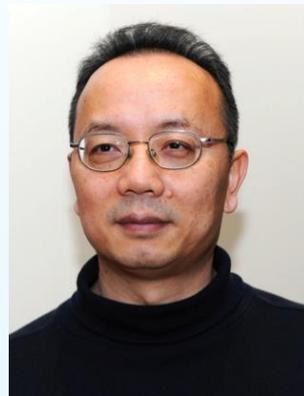
**报告人：张增辉教授**

**工作单位：华东师范大学、纽约大学**

**时 间：2017年10月23日，  
星期一上午10:00**

**地 点：波谱楼1017室**

**邀请人：杨明晖/唐淳研究员**



**报告内容：**介绍课题组最近发展的用于精确高效的计算预测蛋白-配体和蛋白-蛋白相互作用的结合自由能及其蛋白变异对结合自由能的定量影响的计算新方法。这些新方法的应用为我们研究，认识和设计蛋白-配体及蛋白-蛋白相互作用提供了非常重要和精确定量的原子层面的信息，其理论计算和预测的精度已经基本趋近于实验误差范围，这些方法的应用预计将对药物设计，抗体设计和蛋白设计提供具有实际意义的理论计算指导。

**专家简介：**张增辉教授，1982年毕业于上海华东师范大学，获学士学位，1987年获美国休斯顿大学化学物理博士学位，1987~1990年在加州大学伯克莱分校进行博士后研究工作。2001年荣获美国基金委颁发的“总统教授奖”。2002年国家基金委“海外青年合作基金”获得者，2003年成为第五批“长江学者”讲座教授，2009年入选中组部“千人计划”。现为纽约大学、华东师范大学教授。张增辉教授的研究工作主要集中于生物大分子的理论化学计算,蛋白质-配体的相互作用和药物分子设计；多原子分子的反应动力学的理论研究，包括气相、气-固相分子反应动力学，光化学反应动力学，分子光谱学，势能面的计算和从头算量子动力学。张教授是国际上著名的理论化学家，在国际著名学术刊物上发表了300余篇研究论文，论文被引用总次数近10,000次、H-index超过50。