

## 分子对接与全局极小化方法

### Molecular Docking and Global Minimization Methods

投稿时间: 2000-6-16      最后修改时间: 2000-8-23

稿件编号: 20010310

中文关键词: [分子对接](#) [全局极小化](#) [势能平滑](#)

英文关键词: [molecular docking](#) [global minimization](#) [potential smoothing](#)

基金项目: 国家自然科学基金资助项目 (39760027) .

作者	单位
<a href="#">李炜疆</a>	<a href="#">江南大学工业生物技术教育部重点实验室, 无锡 214036</a>

摘要点击次数: 101

全文下载次数: 12

中文摘要:

全局极小化方法及其在结构生物学中的应用近年来取得了显著的进展. 适当简化的分子对接问题是全局极小化方法的一个很好目标, 并且是当前一个相当活跃的研究领域. 对接可分为两类: 主要用于从头配体设计的细致对接和用于已知化合物数据库筛选以发现药物的粗略对接, 它们对全局极小化算法的要求是不同的. 简要评述了新出现的适合于对接问题的随机和确定性全局极小化算法, 其中势能平滑算法看来很有希望, 值得密切关注.

英文摘要:

Global minimization methods and their applications to structural molecular biology have made significant progresses in recent years. An appropriately simplified molecular docking problem is a good object of global minimization, which is now a rather active research area. Molecular docking can be divided into two categories. The detailed docking for *de novo* ligand design and the rough docking for known chemical database screening for drug discovery. Their demands for the global minimization algorithms are different. New stochastic and deterministic global minimization algorithms that are suitable for docking problems are briefly reviewed. Those algorithms with potential smoothing techniques seem to be promising and are worth close noting.

[查看全文](#)

[关闭](#)

[下载PDF阅读器](#)

您是第367243位访问者.

主办单位: 中国科学院生物物理研究所和中国生物物理学会      单位地址: 北京市朝阳区大屯路15号  
服务热线: 010-64888459      传真: 010-64889892      邮编: 100101      Email: prog@sun5.ibp.ac.cn  
本系统由勤云公司设计, 联系电话: 010-62862645, 网址: <http://www.e-tiller.com>

京ICP备05002794号