

蛋白质功能预测——基于结构的计算方法

明灯明

复旦大学生命科学学院生物物理系

人们普遍接受这样一个观念，即生物大分子的结构决定着它的生物功能。然而，结构决定功能这一理念的具体细节却可以千差万别。对上述观念的一个似乎更加全面的修正是，大分子的结构和它的动力学决定了它的功能。这里的功能包括蛋白质可能涉及的生物化学反应、可能参与的小分子互作、蛋白质互作及蛋白质-DNA 互作等。

这里我们报告了一种利用蛋白质结构动力学扰动原理来预测小分子相互作用位点的工作，并在此基础上，通过大规模构建蛋白质结构域功能信息库的方法开发了一种利用氨基酸序列信息来预测蛋白质功能（位点）的算法。在蛋白质互作方面，我们通过构建蛋白质结构表面贴片的方法提出了一个基于三维结构匹配和动力学（四维）耦合的预测蛋白质相互作用的方法。最后，我们还提出了近期内可能完成的若干发展蛋白质功能预测（包括特别是小分子互作和蛋白质互作）的新方向。