

e-Science应用

PDBbind数据库在计算机辅助药物设计中的应用

刘志海,程铁军,王任小

上海市零陵路345号上海有机化学研究所

摘要:

本文首先回顾了e-Science的产生背景与内涵,分析了信息化技术在现代计算机辅助药物设计中的重要作用与意义。然后介绍本课题组科研工作的主要内容与框架,以PDBbind数据库的构建和开发为案例,阐明本课题组的信息化应用架构,介绍了一些基于PDBbind数据库开发的软件方法以及研究实例。最后对e-Science在计算机辅助药物设计领域的发展方向做了一些思考和展望。

关键词: 科研信息化;信息化平台;PDBbind数据库;计算机辅助药物设计

Application of the PDBbind Database in Computer-Aided Drug Design

Shanghai Institute of Organic Chemistry, Chinese Academy of Sciences

Abstract:

In this paper, we first review the background and essence of e-Science, and analyze its impact on computer-aided drug design. We then introduce the on-going research in our group, in particular the construction and implementation of the PDBbind database, reveal the architecture of our information platform, and list some representative research achievements in computer-aided drug design based on the PDBbind database. Finally, the future development of e-Science in computer-aided drug design is prospected.

Keywords: e-Science Information-based platform PDBbind database Computer-aided Drug design

收稿日期 2009-05-07 修回日期 2009-08-03 网络版发布日期 2009-10-22

DOI:

基金项目:

通讯作者: 刘志海

作者简介:

作者Email:

参考文献:

本刊中的类似文章

文章评论

扩展功能

本文信息

- ▶ Supporting info
- ▶ PDF(716KB)
- ▶ [HTML全文]
- ▶ 参考文献[PDF]
- ▶ 参考文献

服务与反馈

- ▶ 把本文推荐给朋友
- ▶ 加入我的书架
- ▶ 加入引用管理器
- ▶ 引用本文
- ▶ Email Alert
- ▶ 文章反馈
- ▶ 浏览反馈信息

本文关键词相关文章

- ▶ 科研信息化;信息化平台;PDBbind数据库;计算机辅助药物设计

本文作者相关文章

- ▶ 刘志海
- ▶ 程铁军
- ▶ 王任小

PubMed

- ▶ Article by Liu,Z.H
- ▶ Article by Cheng,T.J
- ▶ Article by Yu,L.X

反馈人	<input type="text"/>	邮箱地址	<input type="text"/>
反			

反馈
标题

验证码

0515