

综述与编译

虚拟配体筛选：策略、前景及其限制

黄世杰编译

(军事医学科学院毒物药物研究所, 北京 100850)

收稿日期 2006-9-5 修回日期 网络版发布日期 2009-6-1 接受日期

摘要 与高通量筛选相比, 虚拟配体筛选 (VS) 是用计算机程序选择化合物, 预测它们与靶受体的结合情况。其关键前提是知晓蛋白-配体结合所需空间和能量的标准。本文讨论了VS的靶选择, 分析和制备及如何编辑候选配体数据库。也考虑了VS运转的工具、策略、评分的精确度和结果的排序问题。

关键词 [虚拟筛选](#); [靶受体](#); [蛋白-配体结合](#)

分类号 [R914.2](#)

Abstract

Key words

DOI:

通讯作者

扩展功能

本文信息

▶ [Supporting info](#)

▶ [PDF\(54KB\)](#)

▶ [\[HTML全文\]\(0KB\)](#)

▶ [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](#)

▶ [复制索引](#)

▶ [Email Alert](#)

▶ [文章反馈](#)

▶ [浏览反馈信息](#)

相关信息

▶ [本刊中包含“虚拟筛选; 靶受体; 蛋白-配体结合”的相关文章](#)

▶ [本文作者相关文章](#)

· [黄世杰编译](#)