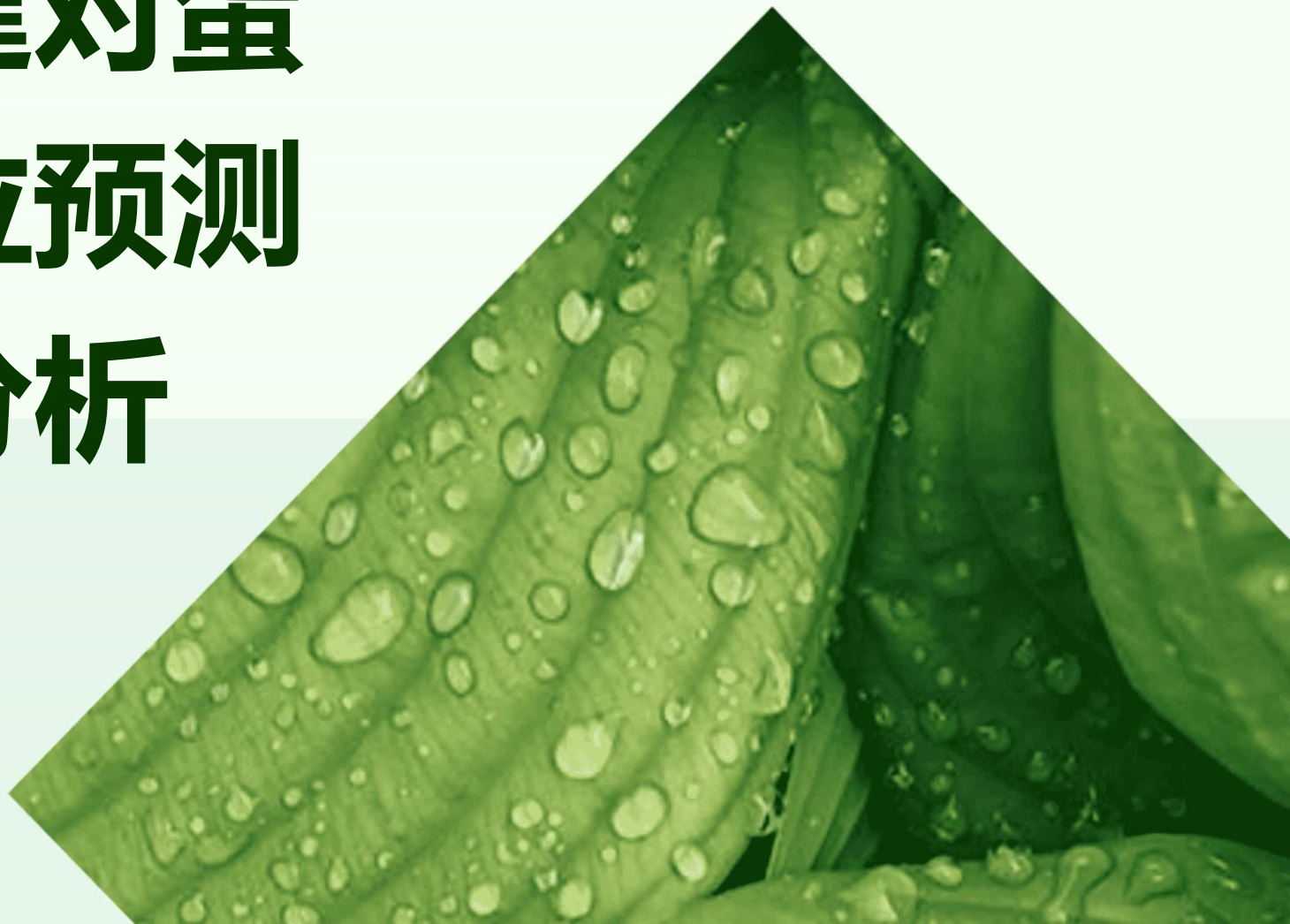


利用同源模建对蛋白的抗原表位预测和抑制机理分析

汇报人:

2024-01-17



目 录

- 引言
- 同源模建技术概述
- 抗原表位预测方法介绍
- 抑制机理分析方法介绍
- 利用同源模建对蛋白抗原表位预测和抑制机理分析实例
- 总结与展望



01

引言





研究背景和意义

抗原表位预测重要性

抗原表位是蛋白质分子中具有免疫原性的区域，对于疫苗设计和免疫治疗至关重要。通过预测抗原表位，可以更加精准地设计和开发新型疫苗和免疫疗法。

同源模建的应用

同源模建是一种基于已知蛋白质结构来预测未知蛋白质结构的方法。在抗原表位预测中，同源模建可以帮助我们理解蛋白质的三维结构和功能，从而更准确地预测抗原表位。

抑制机理分析的意义

抑制机理分析是研究蛋白质相互作用和调控机制的重要手段。通过深入了解抑制机理，可以为药物设计和疾病治疗提供新的思路和方法。

研究目的和内容

01

研究目的

本研究旨在利用同源建模方法对蛋白质的抗原表位进行预测，并分析其抑制机理，为疫苗设计、免疫治疗和药物开发提供理论支持和实践指导。

02

构建蛋白质的三维结构模型

利用同源建模方法，基于已知蛋白质结构信息，构建目标蛋白质的三维结构模型。

03

抗原表位预测

通过分析蛋白质的三维结构和功能特点，利用生物信息学方法和机器学习算法，预测目标蛋白质的抗原表位。

04

抑制机理分析

通过分子对接、分子动力学模拟等方法，研究抗原表位与抑制剂之间的相互作用和结合模式，揭示其抑制机理。

05

实验验证

通过生物学实验方法，如免疫学实验、细胞实验等，对所预测的抗原表位和抑制机理进行验证和评估。



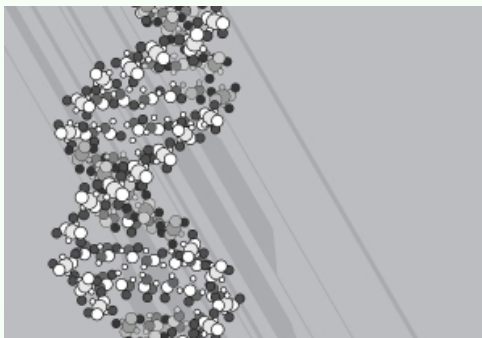
02

同源建模技术概述



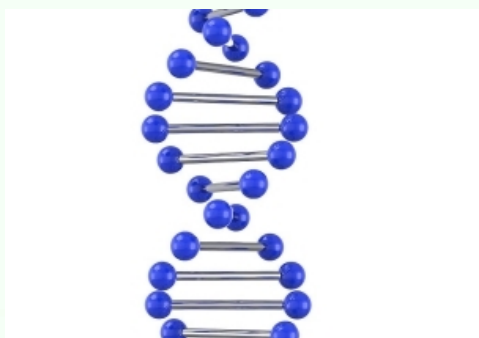


同源模建技术原理



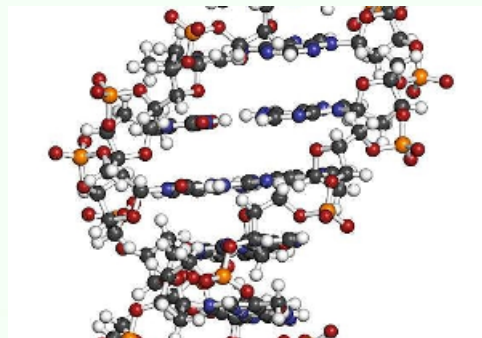
模板选择

选择与目标蛋白序列相似度高、结构已知的蛋白作为模板。



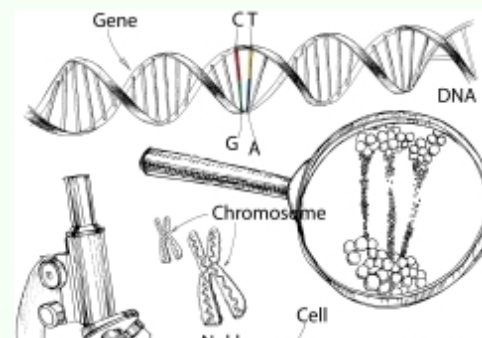
目标-模板比对

将目标蛋白序列与模板蛋白序列进行比对，确定保守区域和可变区域。



模型构建

基于模板蛋白的三维结构，构建目标蛋白的三维模型，包括侧链的添加和优化。



模型评估与优化

对构建的模型进行评估，针对不合理的地方进行优化，提高模型的准确性。



同源模建技术应用范围

● 抗原表位预测

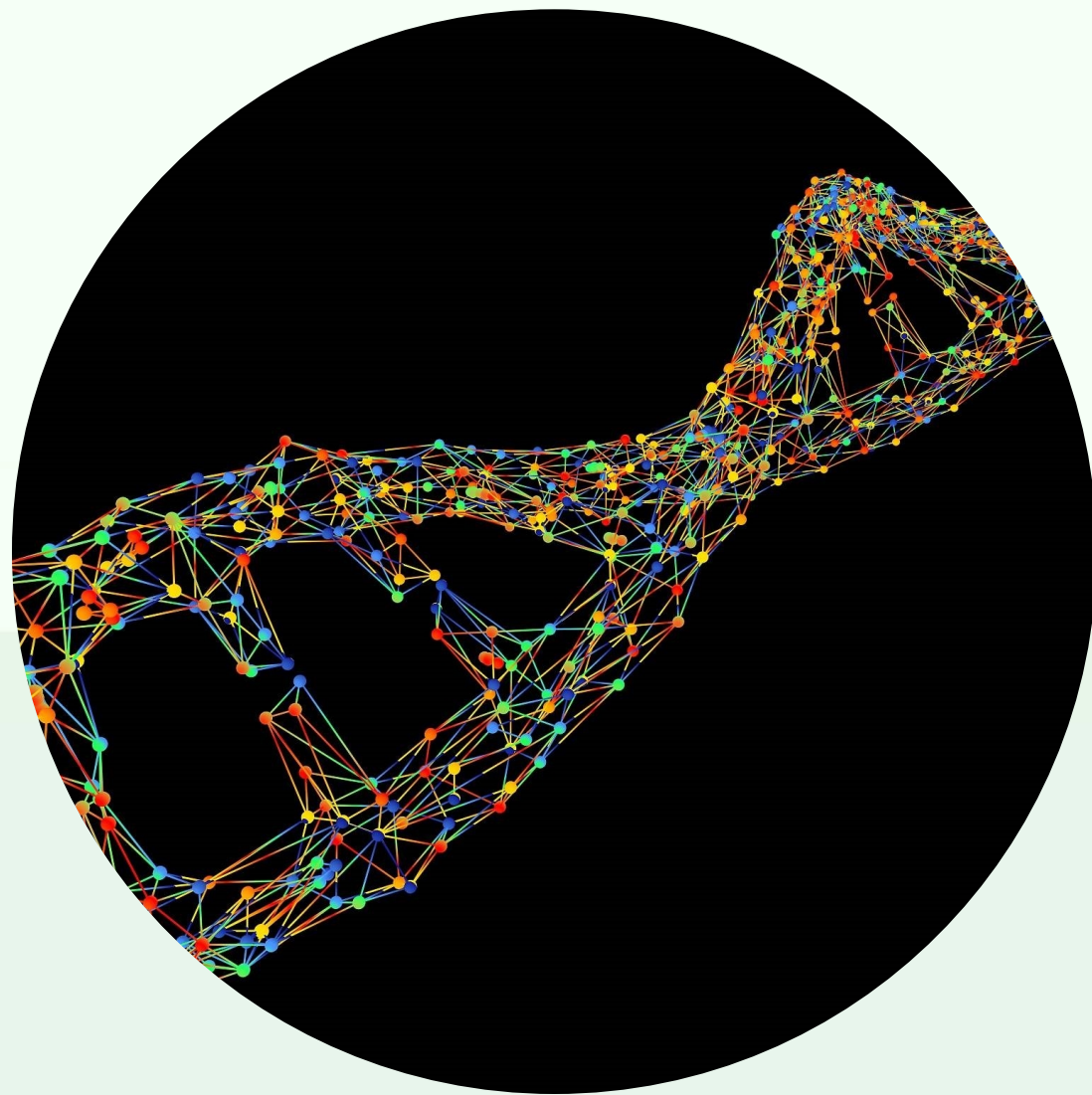
通过同源模建技术预测蛋白的三维结构，进而分析潜在的抗原表位。

● 药物设计

基于同源模建技术构建的蛋白三维结构，设计针对特定靶点的药物。

● 蛋白质工程

利用同源模建技术对蛋白质进行改造和优化，提高其功能和稳定性。





同源建模技术优缺点



01

优点



02

可以快速预测蛋白的三维结构。



03

对于序列相似度高的蛋白，预测结果较为准确。



同源建模技术优缺点



- 可以为药物设计和蛋白质工程提供重要依据。





同源建模技术优缺点

01

缺点

02

对于序列相似度低的蛋白，预测结果可能不准确。

03

无法考虑蛋白的动态变化和相互作用。

04

需要结合其他实验手段进行验证和优化。



03

抗原表位预测方法介绍



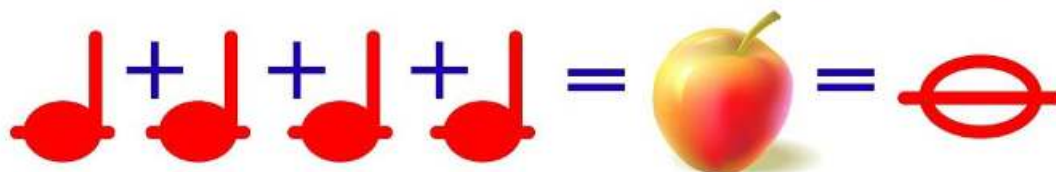
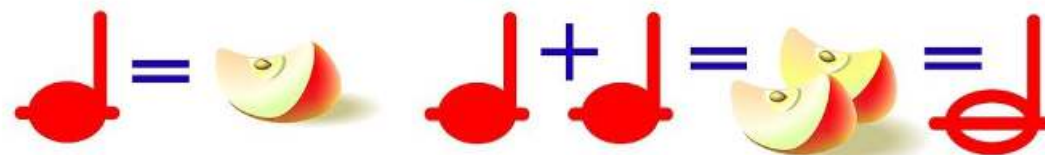
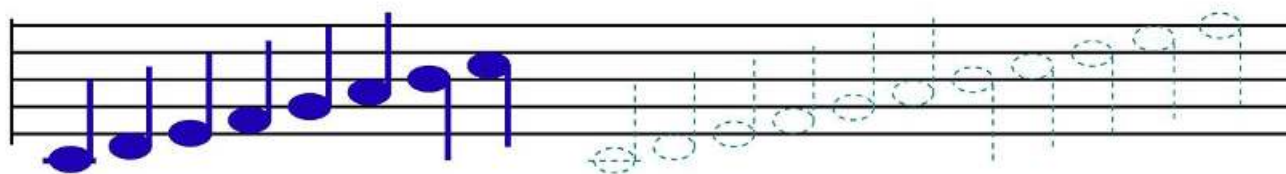
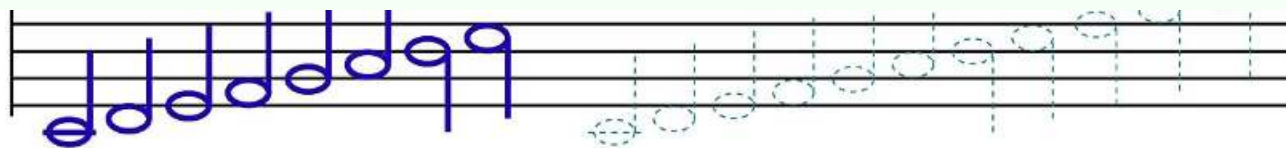
基于序列比对方法

序列比对

通过比对目标蛋白与已知抗原表位的蛋白序列，寻找相似的序列片段，进而预测潜在的抗原表位。

保守性分析

在比对结果中，关注保守性较高的区域，这些区域往往与蛋白的功能和抗原性密切相关。



以上内容仅为本文档的试下载部分，为可阅读页数的一半内容。如要下载或阅读全文，请访问：
<https://d.book118.com/175232220344011221>