

1278. **NGUYỄN HỮU THỌ**. Tìm vị trí gắn kết trên phân tử DNA và protein của các phân tử nhỏ bằng phương pháp AB-INITIO: Đề tài NCKH. QT.08.22 / Nguyễn Hữu Thọ. - H. : ĐHKHTN, 2008. - 39 tr.

A	MỞ ĐẦU	1
B	PHƯƠNG PHÁP NGHIÊN CỨU	4
	I TỔNG QUAN VỀ ĐỐI TƯỢNG NGHIÊN CỨU	4
	1. Phân tử DNA	4
	2. Phân tử Protein	5
	II. CƠ SỞ LÝ THUYẾT	5
	1. Phương trình Schrodinger	5
	2. Các phương pháp gần đúng giải phương trình Schrodinger	8
	3. Phương pháp động lực phân tử bán lượng tử.....	18
C	KẾT QUẢ VÀ THẢO LUẬN	25
	1. Gắn kết của HCHO trên DNA.....	25
	2. Gắn kết của Hydrazin trên DNA	28
	3. Gắn kết của Benzylamin trên DNA.....	30
	4. Gắn kết của Hydrazin trên Protein.....	34
D	KẾT LUẬN.....	37
	TÀI LIỆU THAM KHẢO	38