Стадии молекулярного докинга

1. Выбор лиганда (ГМКСФ)
   1. Органики сделали
   2. ЭБД
2. Подготовка лиганда (правило 5 Липински, правило 3 Йоргенсена – фильтрация молекул на проникающую способность)
   1. Константа кислотности – оценка протонированных соединений среди всех (обычно программы автоматически протонируют азот автоматически) - pKa
   2. Оптимизация геометрических параметров
   3. Оценка ионизации при физиологических пш
3. Поиск потенциальной биологической мишени
   1. Pass online – генерирует потенциально возможные биологические мишени
4. Подготовка белка к расчету
   1. PDB загрузка геометрических параметров белков (они без водорода, его нужно поставить)
   2. Исправление ошибок в интерпретации геометрических параметров (добавление атомов водорода, поиск потерянных тяжёлых атомов, альтернативные позиции АК остатков и прочее) – Protein Preparation
5. Поиск места связывания
   1. Если знаем место – прямой докинг
   2. Литература
   3. Эксперименты
6. Процедура молекулярного докинга
   1. Выбор программы
   2. Выбор протокола (жесткий, гибкий, принудительный, ковалентный и тд)
7. Анализ результатов докинга

База данных лигандов (наборы) – zinc

PubChem – 3d структура химического соединения