Autodock分子对接

现在使用Autodock进行分子对接,已经假定所有的相关的软件都已经安装完好,现在使用蛋白酶1YT9的晶体结构作为分子对接的受体,结构中的配体IOS作为对接的配体分子。

这个蛋白酶的晶体结构的获取需要在数据库pubchem中进行提取,在这个数据库中查找到对应的数据。

本教程采用蛋白酶[1YT9](https://www.rcsb.org/pdb/explore/explore.do?structureId=1YT9)的晶体结构作为分子对接的受体，结构中的配体IOS作为对接的配体分子。

这里为了获取到1YT9这个晶体的结构,需要做一些东西,首先使用软件PyMOL将这个晶体显示出来,如下所示:



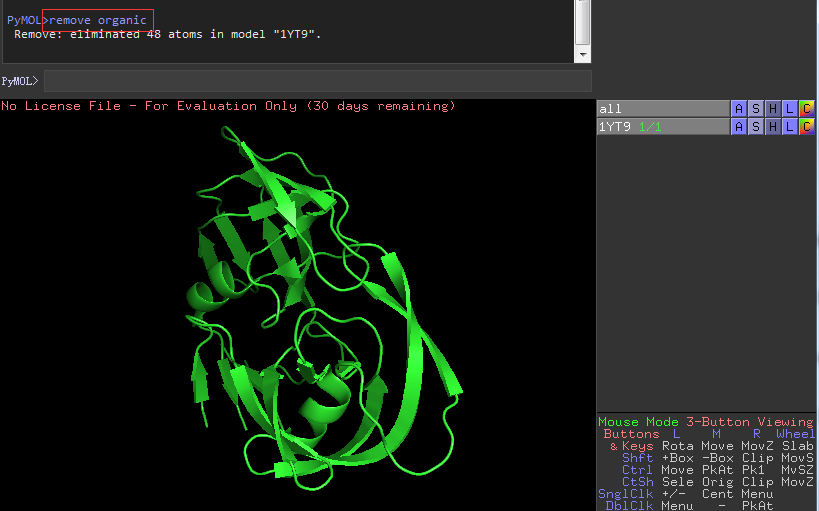
现在需要把其中的IOS配体去掉,然后再把其中的IOS单独保存下来。

使用PyMOL的命令行方式去掉大分子中的IOS配体,然后再将IOS单独的保存下来。现在，首先把IOS大分子获取到,处理的方式是在命令行情况下,使用命令:

删掉配体:

remove organic

下面就是结果数据:



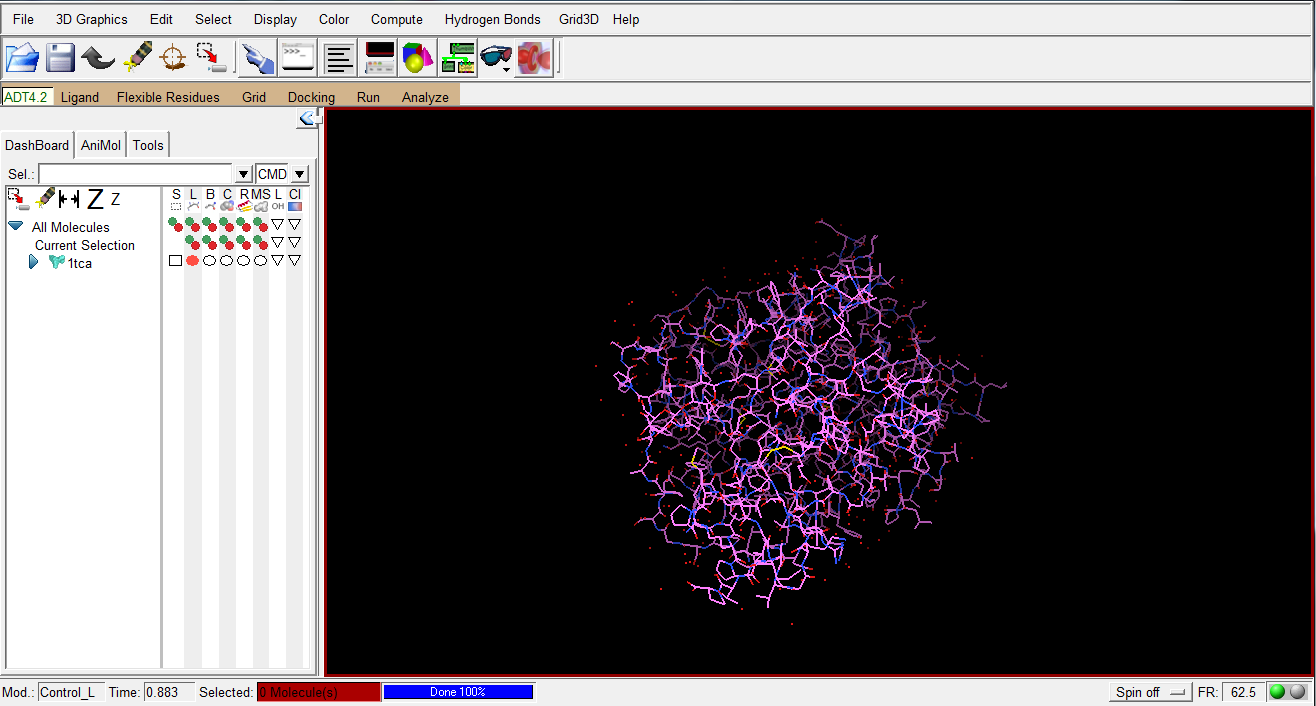
去掉水分:

## Autodock分子对接

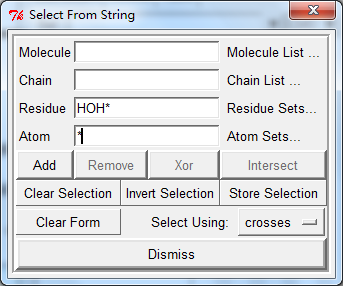
### Autodock处理蛋白质

在进行对接的时候，需要对配体蛋白质进行删除水分子，加氢，以及计算点电荷的操作，下面对这个过程记性相关的操作。

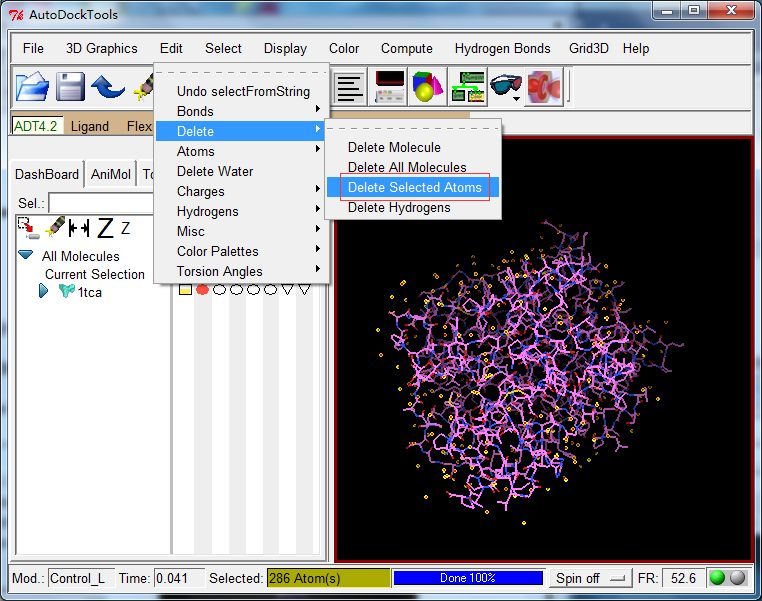
运行autodock软件, file-read molecule 打开下载的pdb 文件，即1TCA.pdb。其中红点表示水分子。



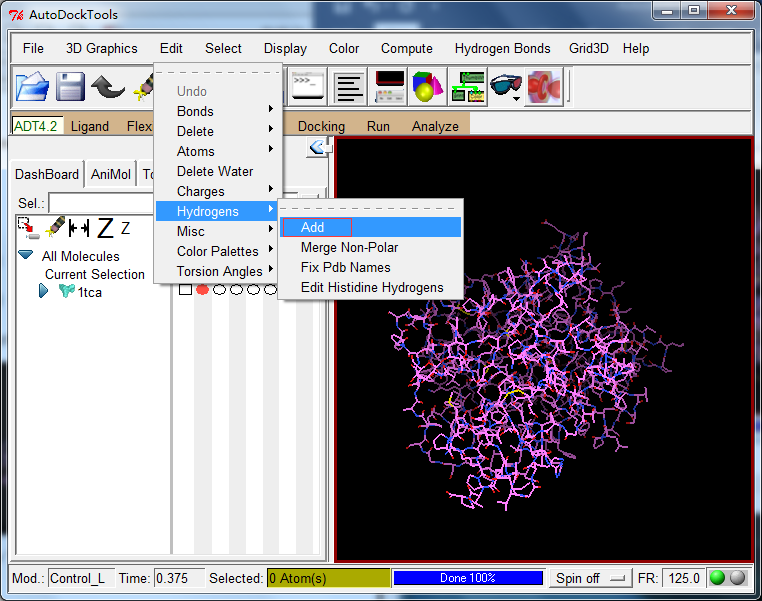
删除水分子select -select from string 在Reside中输入HOH\*,在Atom中输入\*并单击Add如下：其中水分子变为黄色,



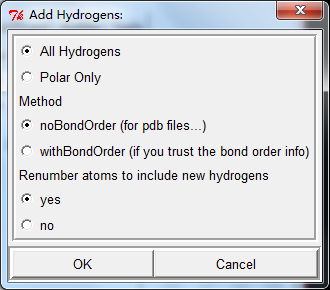
然后edit-delete -delete selected atom 点击continue



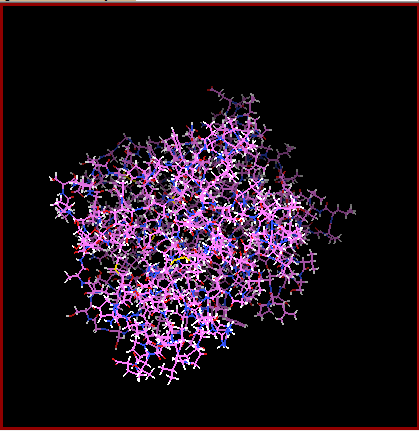
加氢 edit-hydrogens-add 如下：点击ok就行，



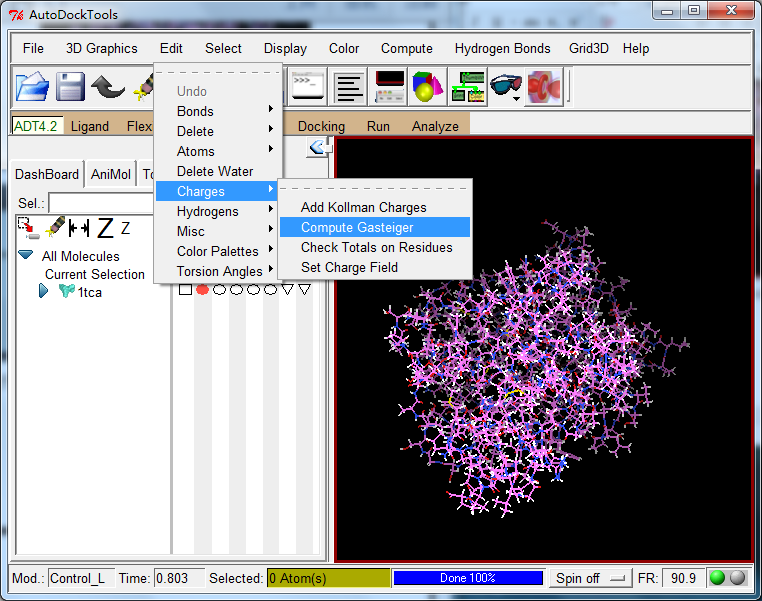
下面是点击OK的操作:



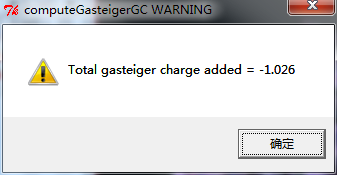
下面查看加氢之后的可视化的结果:



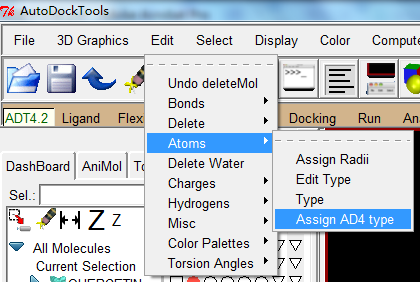
接下来进行的是添加电荷的操作:计算点电荷 edit-charges-compute gasteiger 点击确定。



下面进行的操作就是进行确定计算点电荷的确定操作:



菜单栏“Edit->Atoms->Assign AD4 type”



注意,这里一定要添加,否则保存成pdbqt文件的话其实是不能完成的。