

Mandenol 与 piezo1 分子对接

2024-01-09

LiChuang Huang



@ 立效研究院

Contents

1	摘要	1
2	前言	1
3	材料和方法	1
3.1	材料	1
3.2	方法	1
4	分析结果	1
5	结论	1
6	附：分析流程	1
6.1	分子对接	1
	Reference	2

List of Figures

1	Overall combining Affinity	1
2	Mandenol combine PIEZO1	2

List of Tables

1 摘要

分子对接见 Fig. 1

2 前言

3 材料和方法

3.1 材料

3.2 方法

Mainly used method:

- AutoDock vina used for molecular docking¹.
- Other R packages (eg., dplyr and ggplot2) used for statistic analysis or data visualization.

4 分析结果

5 结论

6 附：分析流程

6.1 分子对接

Figure 1 (下方图) 为图 Overall combining Affinity 概览。

(对应文件为 Figure+Table/Overall-combining-Affinity.pdf)

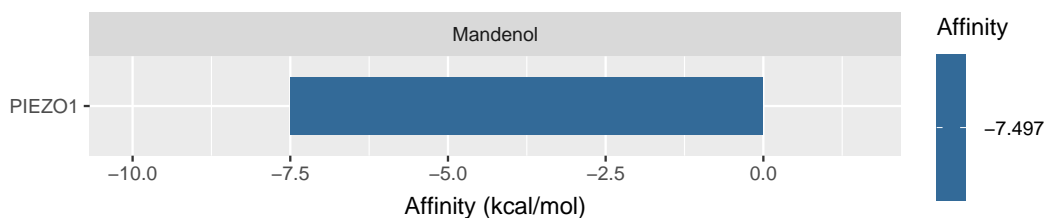


Figure 1: Overall combining Affinity

Figure 2 (下方图) 为图 Mandenol combine PIEZO1 概览。

(对应文件为 Figure+Table/5282184_into_piezo1.png)

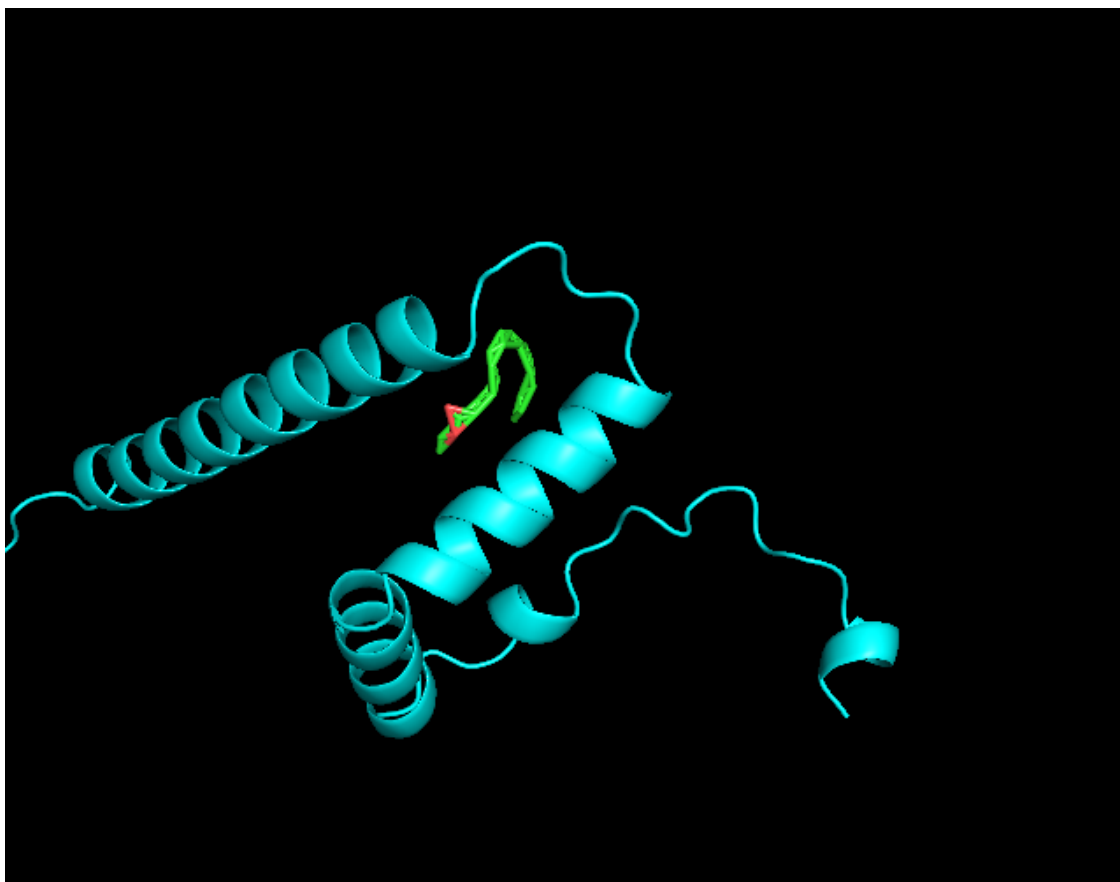


Figure 2: Mandenol combine PIEZO1

Reference

1. Eberhardt, J., Santos-Martins, D., Tillack, A. F. & Forli, S. AutoDock vina 1.2.0: New docking methods, expanded force field, and python bindings. *Journal of Chemical Information and Modeling* **61**, 3891–3898 (2021).