

对接简单步骤:

1. 准备面文件与受体 pabqt 文件

① 受体文件 pabqt file → readmolecule

下载 pdb 文件, 导入, 去水加 H (用 pymol 可)

Grid → macromolecular → choose → (强力选择)

自动生成 pabqt 文件, 文件夹会有.

delete, 以便处理受体.

② 配体 pabqt 文件

1) ligand → input → open → 配体 pdb 文件

2) ligand → input → choose → 点选

3) ligand → output → save as → pabqt 文件

2. 盒子参数获取. (Grid 操作) Grid Box

1) Grid → macro. → 受体 pabqt 文件

2) Grid → set map types → choose ligands

3) Grid → Grid box . 放框中

1) 单击. 盒选框 不勾选, 拖出小分子. 面勾回

File → save current.

Docking output → vina config → save

3. 运行 dock vina

Run → run autodock vina n分钟


对接完全. 切记命令行

n个结合能

delete all

4 Analyze → Docking → open Autodock vina Result

接着, Analyze → macromolecular → open 大分子

 简单查看其结合。但要美观, 要 PyMOL
... 要导出 不错的图. 故只导出小分子

导出后, 再导入 PyMOL → 导入大分子即可

也接着可以导出 PyMOL 导出大小结合图

5. PyMOL 美化