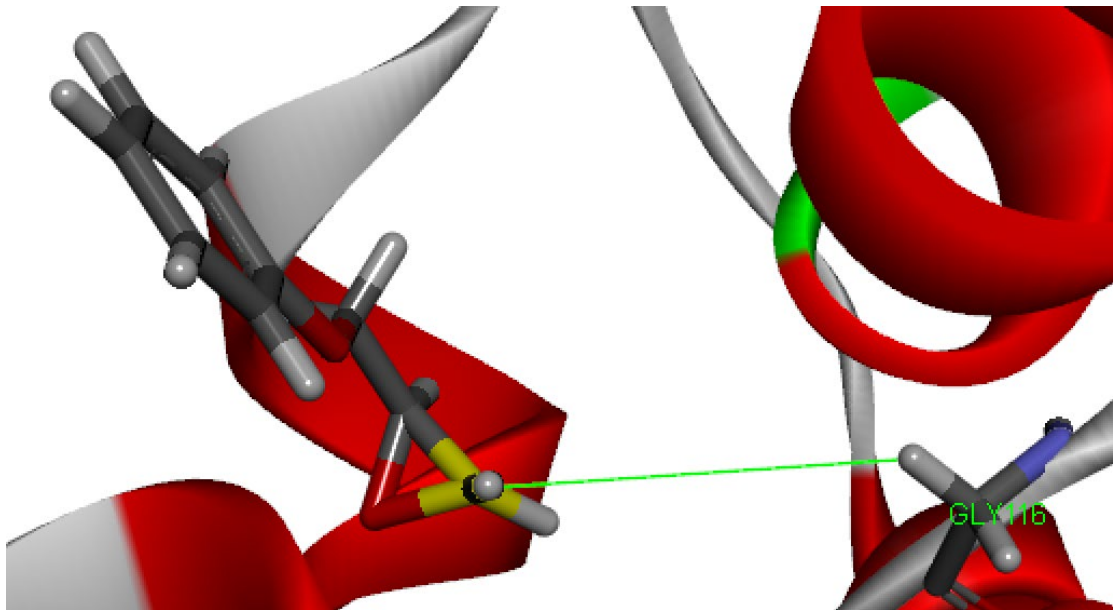


README

- 1.首先获取酶的 pdb 文件，反应物的 pdb 文件
- 2.确定酶催化中心进攻或被进攻或有电子转移的氨基酸残基编号，如 116 位 GLY 氨基酸残基，则 The amino acid residue numbers 一栏填写 116，The amino acid residue name 一栏填写 GLY；并指定该氨基酸残基的某一特定原子，如 HA3，The amino acid residue atom name 填写 HA3
- 3.确定测量和控制的反应物的原子，如 STO 的 C2，则在 Ligand atoms to be measured 一栏填写 C2
- 4.确定希望计算的突变氨基酸，填写格式为 F113D，若希望突变多个单突，可在 Residues desired for mutation 一栏空格填写，如 F113D F113A F113C F156D 等



整体填写示例如下：

NAC4ED 上传表单栏目信息：

- 1) Protein Name: eg: ANEH
- 2) Ligand Name: eg: sto
- 3) Protein Chains: eg: A
- 4) The amino acid residue numbers: eg: 116
- 5) The amino acid residue name: eg: GLY
- 6) The amino acid residue atom name: eg: HA3
- 7) Ligand atoms to be measured: eg: C2
- 8) Residues desired for mutation: eg: F113D S86R D3A

上传 ProteinFile: 文件格式为 pdb, 大小为 5M 以内

上传 LigandFile: 文件格式为 pdb 或 sdf, 大小为 5M 以内