ESDS递交说明

该系统目标是通过对接打分快速高通量筛选酶分子突变体，以提高实验效率。其评价指标包含两种，一为对接后复合物构象打分排名，一为根据催化机理确定的酶分子活性中心氨基酸残基上的某一原子与配体某一原子的距离。

下面为详细说明：

**1.Receptor Atom Type：**需用户指定的希望测量距离的酶分子某一关键氨基酸上的原子类型

**2.Receptor Amino Acid：**需用户指定的希望测量距离的酶分子某一关键氨基酸残基

**3.The amino acid number of the receptor：**需用户指定的希望测量距离的酶分子某一关键氨基酸残基的编号

**4.The central amino acid site of the receptor：**需用户指定的酶分子活性中心的氨基酸残基（如催化三联体）

**5.Ligand atomic number：**需用户指定希望测量距离的底物原子编号

**6.Ligand name：**底物名称

**7.Protein name：**酶分子名称

**8.Proteins need mutated chains：**需要突变的氨基酸所在链

**9.Mutation Point：**需要突变点

**10.Email：**邮箱

**Eg：**

1. 酶分子pdb文件为**5uro.pdb**，即为第7项和上传文件；
2. 底物分子文件为**Don.sdf/Don.pdb**；即为第6项和上传文件
3. 根据对该酶分子研究的文献调研，确定该酶的活性中心氨基酸为**D116、Y167、Y252**，即为第4项
4. 希望指定突变确定对接结果，如**A**链的**F165E，F165D，A259N**等，即为第8项和第9项，突变点以空格间隔
5. 希望确定突变后某一氨基酸上的原子和配体上的某一原子的距离，比如希望测量突变后，该酶氨基酸残基**Y167**上的**O**原子与底物的第**1**个原子的距离，则第1项填写O，第2项填写TYR，第3项填写167，第5项填写1。若未指定希望测定的距离值，系统默认给出催化活性中心任一氨基酸的C原子与底物质心间的距离

**注：**

若酶分子含有辅因子，如金属酶、氧化还原酶P450等，耗费时间较长。

目前系统只能运行多个单突任务，双突任务在优化中