# 1.准备受体使用说明：

## 1.1从PDB数据库下载蛋白质结构：

根据基因名或蛋白质的PDB ID从PDB数据库批量下载蛋白质结构用于对接。

(1)首先点击“查看输入示例”，仿照示例将要下载的所有PDB ID或基因名写在一个excel文件中，文件格式支持xlsx和xls。每个单元格内写一个PDB ID或基因名，但不能既有基因名又有PDB ID，不要写入其他的标题行号等。

(2)然后点击“选择待下载文件”，选择该文件。

(3)然后点击“选择保存路径”，任选一个保存路径。

(4)点击开始下载并等待即可。

(5)下载完成后可以点击“打开下载失败列表”，查看下载失败的蛋白(空白即为全部下载成功)。

## 1.2受体预处理及格式转化：

该步骤是把待对接的受体进行预处理并转化为Vina能够识别的.pdbqt格式。

！！！使用此功能需要先安装mgltools1.5.6,注意软件安装路径不要含有中文及空格

请双击与main文件夹同目录下的mgltools\_win32\_1.5.6\_Setup.exe程序安装mgltools1.5.6，安装完成后请在本软件中设置安装路径，要求输入的路径为mgltools的python.exe解释器所在路径。(若之前已安装过，直接指定路径即可)python.exe通常位于安装目录的第一层文件夹下。

(1)设置mgltools的python.exe所在路径，注意是路径不是文件名。

(2)选择待对接的受体所在路径，受体格式支持.pdb格式，支持批量准备受体。(如1.1步骤中的pdb文件保存路径)

(3)选择结果输出路径。

(4)选择预处理方式。

(5)选择质子化状态。

(6)点击开始转化，等待完成即可。

！！！若受体格式转化步骤中，命令行报错：

Fail to prepare xxxx.pdb. It is possible that the protein contains metal ions that are not recognized by the Autodock force field or other errors.

原因：蛋白质结构中含有不包含在Autodock力场中的特殊原子或离子，Autodock力场含有如下金属元素的力场参数：Ca,Mg,Zn,Mn,Fe。

解决方法：预先删除特殊的原子和离子或手动在AutoodckTools中准备受体。