# 2.准备配体使用说明：

## 2.1 从PubChem数据库下载小分子化合物结构：

该步骤为通过小分子化合物的CID或SMILES批量从PubChem下载3D结构文件(.sdf)。PubChem数据库化合物的3D结构经过能量最小化优化，是较为理想的对接初始构象。

(1)首先新建一个.xlsx或.xls格式的excel表格，将要下载的小分子化合物的CID号或SMILES写入，注意一个单元格表示一个CID或SMILES，一个表格中要么全是CID要么全是SMILES，不要添加其他冗余信息如行名列名等，可参考批量下载蛋白质受体的输入文件样例。

1. 点击“选择待下载文件”，选择这个excel表。

(3)点击“选择保存路径”，任选一个保存路径。

(4)选择下载模式。

(5)点击开始下载并等待即可。

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

## 2.2配体结构预处理及格式转化：

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

(1)点击“选择待对接的配体所在路径”，该软件会自动识别此路径下的所有sdf,mol2,mol格式文件作为配体，推荐在pubchem数据库下载小分子的3D结构。若您不是通过本软件方法获取的配体结构文件，且您要对接的多个配体保存在一个单独的结构文件中时，您可以点击“分割单一数据库文件”，然后选择包含所有配体的结构文件，支持格式为sdf,mol2和mol，软件会自动将其分割为单独的配体，保存在您输出路径下的split\_database文件夹中，并对分割后的每个配体进行预处理及结构转化，此情形多见于化合物库的虚拟筛选工作中。

(2)点击 “选择结果输出路径”，设置准备后的配体输出路径。

(3)当所用配体结构文件为2D结构时请勾选“随机化初始构象”，以此减少对接冲突。

(3)选择是否要加氢以及加氢的环境，通常选择pH7.4(人体环境)或7(中性)条件即可。

(4)点击“开始转化”等待即可。

！！！注意：对于又大又复杂的配体和部分2D结构的配体OpenBabel可能在格式转换过程中出错，这是由于pdbqt文件格式不包含化学键的信息因而导致键的错乱。对于转换后的.pdbqt格式文件，建议通过可视化软件(如pymol)检查以确认无误。