# 3批量生成对接配置文件使用说明：

本程序有四种配置文件生成模式：

1.类比对接；2.盲对接；3.关键氨基酸处对接；4.自定义

(1)点击“选择结果输出路径”，选择一个配置文件保存位置

(2)在选择输出模式下拉列表中选择要使用的方法

(3)设置额外参数

(4)根据选择的方法在子模块对应位置输入必须的参数

(5)点击“生成配置文件”即可

## 3.1.类比对接：

将自己的配体对接到蛋白质原配体所在位置。

本功能生成的对接参数对于vina1.1.2和1.2.3软件，用于实验测定的配受体结构的重对接情形，是最佳对接参数，对接盒子参数单位为Å（0.1nm）。

程序参数：盒子中心=原配体几何中心，盒子尺寸=配体回转半径\*4.5

(1)输入所有要生成对接配置文件的共晶配体(蛋白质结构中的原配体)所在文件夹路径，配体须为.pdbqt格式。

(获取方法：通过任意可视化软件打开下载好的蛋白质结构，然后将其中的共晶配体单独保存为pdbqt格式即可)

(2)当使用和共晶配体具有相似作用机制的自己的小分子作配体进行类比对接时，可以按如下方法操作：首先选择共晶配体所在路径生成一个配置文件，然后选择自己的小分子生成另一个配置文件，然后找到这两个文件，选择第一个配置文件的center\_x、y、z与第二个配置文件的size\_x、y、z组成一个新的配置文件用于对接。

## 3.2.盲对接：

本功能是在不知道配受体结合位点的情况下使用，该程序将会自动生成包裹整个蛋白质的最大对接盒子。网络药理学研究中较常使用，但盲对接方法假阳性率较高，不建议采用。

1. 输入所有要生成对接配置文件的受体所在文件夹路径(如第一步中已经准备好的受体所在路径)，受体须为.pdbqt格式，且已经去除掉水，杂质，原配体等干扰因素。
2. 可以选择在恰好包括整个对接盒子的基础上再增大对接盒子尺寸，这是为了给结合在蛋白质表面的配体更多的扭转空间，但不宜增大过多，因为本身盲对接的对接盒子已经很大！

！！！当蛋白质过大时，对接盒子超过27000Å3，Vina会给予警告并显著减慢对接速度，可以忽略该警告，这在盲对接中是正常现象。

当蛋白质特别大时，对接盒子超过一定范围，将导致vina无法进行计算，出现此情况可以适当改小对接盒子。

3.3.关键氨基酸处对接：

本功能是已知结合位点处关键氨基酸残基情况下进行对接。

程序参数：盒子中心=所有关键氨基酸的几何中心；盒子尺寸由用户自行定义。

(1)首先设置对接盒子大小，单位为Å（0.1nm），推荐值为20~30。然后输入所有要生成对接配置文件的受体所在文件夹路径(如第一步中已经准备好的受体所在路径)，注意受体应为.pdbqt格式，且已经去除掉水，杂质，原配体等干扰因素。

(2)在点击生成配置文件后，本程序会提示当前计算配置文件的蛋白质，此时需要输入关键氨基酸所在链及氨基酸序号，每个蛋白质输入关键氨基酸不要超过20个，且无法用于单链长度超过1000个氨基酸的蛋白质。

输入格式为：关键氨基酸所在链的大写符号，英文格式冒号，该链上关键氨基酸的序号，下划线，下一个关键氨基酸序号，…，下一条链的大写符号，英文格式冒号，该链上关键氨基酸的序号，下划线，下一个关键氨基酸序号，…

几个示例：

A:19\_20\_21

A:78\_89\_109,B:99

1. 然后程序会自动选择下一个蛋白质，继续输入关键氨基酸直至所有蛋白输入完毕。

3.4自定义配置文件：

根据自己需求随意设置对接位置的大小和中心即可。

！！！若事先通过AutodockTools确定了对接区域的中心和大小，务必对其进行换算。AutodockTools中的对接区域大小由设置的格点数和格点间距确定，而Vina的参数设置中是直接设定的对接区域大小。