# 5.结果分析使用说明：

若已在“4分子对接”中选择自动执行5.1和5.2中的分析，不必再重复操作。

## 5.1查看结合亲和力

查看所有对接结果的亲和力汇总表(excel格式)和热图(jpg格式)。

(1)点击“选择所有log文件所在路径”，也就是“4分子对接”中的结果输出路径。

(2)点击“选择结果输出路径”，设置保存结合亲和力汇总文件的位置。

(3)点击“分析”等待即可。

！！！输出结果中的RMSD是提取自每次对接日志文件(.log)，每次对接的所有位姿都以第一个位姿作为参考，所以不同对接结果间RMSD大小无法比较！只能比较单次对接结果的不同位姿的RMSD大小。若要计算对接结果同实验测定的共晶配体的RMSD，请使用“6其他功能”。

！！！输出结果中的Ki (Kd)根据对接打分计算，计算公式如下所示。但根据Su等人在CASF-2016数据集上的测试结果，Vina的结合亲和力打分与实验值的皮尔森相关系数仅为0.6左右，故Ki (Kd)的计算值仅供参考！

其中，e为自然常数，△G为结合自由能(对接所得结合亲和力打分，cal/mol)，R为理想气体常数(1.986 cal/K)，温度T取为298K。

! ！！绘制的热图中配体数\*受体数最大为324(亲和力汇总表不受影响)，热图由每次对接结果中结合亲和力最低构象的打分生成，若热图已生成但显示错误可能是配受体过多导致布局困难，可适当减少配受体数目。

## 5.2批量分割对接结果

将Vina对接后生成的包含所有构象的结构分割为单个分子结构。

(1)点击“选择所有对接结果文件所在路径”，也就是“4分子对接”中的结果输出路径。

(2)点击“分割”等待即可。分割结果仍保存在原路径中。

！！！分割结果前请先分析结合亲和力，分割后log文件被移入子文件夹，无法再方便地分析结合亲和力。

！！！无法分割名称中含有如α，β等特殊字符的对接结果。

5.3生成对接复合物

Vina对接后的输出结果中仅包含配体构象，本功能可以将受体和对接后的配体复合为一个结构文件。

(1)点击“选择结合配体”，选择要复合的配体(.pdbqt)。

(2)点击“选择结合受体”，选择要复合的受体(.pdbqt)。

(3)点击“选择结果输出路径”，设定复合物保存位置。

(4)点击“结合”等待即可。

！！！生成复合物后通过可视化软件查看发现蛋白质结构破碎，原因可能是原蛋白质文件结构不完整或存在错误或存在不定型结构域，出现这种情况建议使用其他可视化软件复合。

5.4 查看共晶配体打分

当对接的受体蛋白中含有共晶配体时，如活性抑制剂、药物分子等，可以使用Vina或Vinardo评估其结合亲和力打分，以此指导自己的与共晶配体有相同或相似作用机制的配体的筛选或设计。

1. 首先选择一种打分函数，和自己做对接时候一致即可。
2. 调整共晶配体的质子化状态，请确保共晶配体与自己对接前的配体具有相同pH下的质子化状态，否则二者的打分无法定量比较。
3. 点击“选择受体”，选择不含共晶配体的受体所在路径及名称(.pdbqt)。
4. 点击“选择共晶配体”，选择该受体的共晶配体所在路径及名称(.pdbqt)。
5. 点击“分析”等待即可，结果会弹窗显示。