

文件转换和分子对接的相关命令和脚本

使用 Openbabel 对 593 命中化合物的批量格式转化

首先，对下载的 sdf 文件分隔和处理，命令如下：

```
obabel -isdf query_resultes.sdf -osdf -O clean_results.sdf -unique
```

```
obabel -isdf clean_results.sdf -osdf -O lig.sdf -m -p 7.4
```

然后，将上述命令将得到的 593 个以 lig*.sdf 命名的单结构文件和 covert.sh 文件放入同一文件夹进行批量格式转化

covert.sh 内容如下

```
#!/bin/bash
for i in lig*.sdf; do
    obabel -isdf $i -opdbqt -O ${i%.*}.pdbqt --partialcharge gasteeiger
done
```

#使用 AutoDock Vina 进行批量分子对接

将 Mpro 转化得到的 Mpro.pdbqt、对接参数文件 conf.txt、生成的 593 个 lig*.pdbqt 文件和执行批量分子对接的 vina_screen_local.sh 放入同一文件夹

conf.txt 内容如下

```
receptor = Mpro.pdbqt
```

```
center_x = 8.025
```

```
center_y = -12.56
```

```
center_z = 22.476
```

```
size_x = 24
```

```
size_y = 24
```

```
size_z = 24
```

```
num_modes = 10
```

```
energy_range = 3
```

Vina_screen_local.sh 内容如下

```
#!/bin/bash
```

```
for i in lig*.pdbqt; do
```

```
    b = `basename $i .pdbqt`
```

```
    echo Processing ligand $b
```

```
    mkdir -p $b
```

```
    vina --config conf.txt --ligand $i --out ${b}/out.pdbqt --log ${b}/log.txt
```

```
done
```