Smina教程（一般用于盲对，盒子够大）

Teakki石师兄（http://106.14.188.60:9001/space/64798bd08ed64900c6881d52）

兆寅师弟（）

在服务器上Conda activate smina

1. **配体准备**（薛定谔导出sdf）
2. **受体准备**（薛定谔导出pdb）
3. **对接**
4. 自定义盒子位置（一般是用pymol计算蛋白中心位置）

在pymol中选择处理好的蛋白-命令行centerofmass sele-给出一个坐标中心（盒子中心） Center of Mass: [6.047,0.886,0.850]

选中特异性激动剂计算中心位点

1. 计算盒子中心

在pymolwiki中找到DrawGridBox并且download-在pymol中运行脚本-drawgridbox pdbID-得到Box dimensions(51.06, 42.44, 59.71)

特异性激动剂选中头尾看距离，Wizard-Measure，设置一个稍大的盒子大小

1. **在服务器上对接**

smina --seed 1 --config conf.txt -r receptor.pdb -l ligand.pdb -o result.sdf

例：smina --seed 1 --num\_modes 5 -r receptor.pdb -l ligand.pdb --center\_x 6.047 --center\_y 0.886 --center\_z 0.850 --size\_x 51.06 --size\_y 42.44 --size\_z 59.71 -o dock\_receptor-ligand.pdb

注：conf.txt为包含对接盒子中心/大小、输出构象数等参数的文件：center指对接盒子的中心，size指盒子的长宽高，num\_modes指输出构象数。

1. **导出的.pdb在pymol中查看**

补充，将原有的蛋白内的小分子全部去除；小分子有手性输出每一个手性；不能与薛定谔打分横向比较一般smina比薛定谔分数高；对接模型用特异性激动剂作对接，用来与别的小分子进行对接