·起见证AI药物研发新范式的实现

StoneMIND AI MolGen 使用手册

1. StoneMIND Al[®] MolGen简介

MolGen是一款基于靶点口袋的三维结构和参考分子的特定片段生成百万级别化合物的AI软件,用户可 定制化生成带有特定片段的分子,也可以对生成的分子进一步分析,从各个维度综合判断分子特性, 从而有效支持活性分子骨架的发现。

2. 使用指南

登录

网页端登录网址: https://pinternal.stonewise.cn/en-recommendation 输入邮箱,并将获取的验证码以及图片验证码输入后,即可登录平台。



分子生成

第一步: 上传蛋白质-配体复合物

您上传的蛋白质-配体复合物将被用来定位口袋。请确保上传的文件是复合物,而且包含氢原子,并具 有正确的键级和电荷。

*蛋白配体复合物 ①		如何提交一个	╰分子生成任	务?			
① Co 高级版、标准成会更快得到结 享成会有更长的等待时间但是 分子质量。 级别 ②		1 <u>Le-таселята</u> датамист. 2018.00 нали на полатина мора, петали в соплоти полатина и соплоти и соплот	和正式10、 建石水土中的 素色物的 素质子, 和白素的 开发在口及、 能成 4 并是的代码 的分子,就就有学 的 医病有的 化合成 的 人一个任意分子的外记是来定口说。	2 ALEXA RECONSTRUCTION NEW STATE	ACIA AMARKEDACIA	2328	
标准 高级 尊孪 ┃ 高级设置 ○■		4	2328 2328			2328	
				Compare - Compare Anno 1998 - 1999 - 19	 Этереросливний Этереросливний Этереросливный Этереросливный<!--</td--><td>2328</td><td></td>	2328	
			王志派2323	开始生成	ESM 2328	J	

第二步:点击配体来定位结合口袋

复合物中的配体将用于定位口袋,配体 6 Å 附近的任何残基(包括氨基酸残基、辅助因子、溶剂分子、 金属离子等)都将被视为口袋。如果口袋是空的,且配体未知,建议引入一个任意分子作为标记来定 位口袋



当口袋中的残基包含多个构象时,您可以选择一个或者多个保留

Stone	MIND AI	E Sauce	王志言			E 47 MM		🗳 🖓 I ? 🗈	18	liyulong@stonewise.cn
80	Default 切掛 十 新任务	可选构象 以下残基具有多构象。请选择一个或多个保留。		王志開	23 ²³ 残基		当前平均占有率		×	♡ 插件
05	*蛋白配体复	- + va. 2328			BSER A 118		0.50			
	Prpz.pdl	王志即	Triston.		ASER A 118		0.50			
	級别 ① 标准		2	王志鹏				< 1 >		
	重置 蛋白质	TRA	王志前 2328							
	参考配体 ①		~ ` ~	王志明						c志開 2328
		2 5 W 2 2 5	王志期 2328							
		志市 1328		王志開						
>). Xaa	王志期 2328	王志渊 2328 取消	确认						
					Ŧ	开始生成				

第三步:高级选项(<mark>可选</mark>)

1. 添加PDB ID 以获取电子密度实验数据

输入PDB ID后会自动匹配实验电子密度数据,并在分子生成过程中使用这些数据(注意,系统会自动 根据您输入的pPDB ID获取电子云密度数据,请确保您填入的PDBID与您上传的复合物对应的蛋白的 一致性,否则会导致生成异常)



2. 在口袋中标记关键NCI

标记关键NCI以指示这些原子在与配体相互作用时所发挥的作用。目前可以标记的类型包括氢键受体 (HBA)、氢键供体(HBD)、π体系。

Ŷ	Default 切换项目 <u> つ</u> +新任务 新模型任务 7dy7	7dy7 low 7dy7 med 生成5w 原子高	N 7328			♡ 插件
89	┃ * 蛋白配体复合物 ①	提示: 选择口袋 💽		蛋白质参考配体	and a star	
	🖹 7dy7withh.pdb 替换 副除	E また 105 2328				
	級別 ①	Н				
	2328 标准 高级 募享	E志鹏 2328	王志鹏 2328	2528 J		
	高级设置 💽			H Salu		
	nn	909				
	蛋白质 23 配体	王志鹏 2320	1,24		Com.	
		-0	1			
	2325050 NCI (怎样表标记NCI2)	王志鹏 2328	王志明2320			
	· 氢键供体:					
	清空	点击此处开始标记		$\gamma \gamma $		
	· 氢键受体:	Etam	-/ 1	E E Ban		
	在右側口袋里标记原子 💦 清空	-ma 2328	232	232 ⁸		
	· π堆积:	EBW	王志卿	₹33 mm -		
0	在右側口袋里标记原子 🕺 清空					
				- 2278 开始生成		

3. 保留参考配体上的指定片段

上传参考配体后,点击"参考配体"页签,再点击"添加标记"按钮,即可保留指定片段 请选择有已知活性的分子作为阳性参考分子,并且确保该分子的空间位置位于目标口袋中,而不是在 距离蛋白远的地方。 如下图:选中参考分子中的一个或多个片段,这些片段将在分子生成的过程中被保留,即程 序生成的每个分子都将包含这些片段。

添加标记 点击原子去标记和取消

☆ 按住 SHIFT 键可以框选多个原子 ☆ 最多可以选择三个片段(不破坏双键和环)



您在选择需要保留的片段时,请不要切断双键或三键,以及不要破坏环结构。 对于<mark>保留片段的位置没有限制</mark>:它可以来自参考配体的末端或中间部分。

Tips :

保留片段时可按住shift用鼠标框选标记区域。

如果想保留多环结构中的单个环,可上传配体分子前先做好处理。

第四步:运行任务和查看任务结果

点击"开始生成"提交任务。任务完成时,您将收到来自notification@stonewise.cn邮件提醒



王志明 2328 王志明 2328 王志明 2328 王志明 2328 王志明 2328

任务运行完毕后,即可查看任务结果

() 328	Default ⊘ + 新任务			王志嗣 2328 马扭	转能扫描 炎 用分子动力学分析蛋白配	体相互作用 🔞 子结构检索 🔥 插件
80	♥ 筛选 分子排名前200 找到	200个分子		2323	王志前 23 ²⁸	田 🗄 2D 3D 🖸 导出
	6000			35	A STATE	
	or 王玉和 2328 添加标记 复制 ★★★	 ×× ×× ×× ×× ×× ×× 	2683 添加标记 复制 ★★★	2325 後 添加标记 复制 ★ ★ ★	 (1) (2) (3) (3) (3) (4) (4) (5) (5) (5) (5) (5) (5) (6) (7) (7)	88 ³ 添加标记 复制 ★★★
	☑ 扭转能 S MD 図 检索	山田特能。S MD 园检索	☑ 扭转能 35 MD 図 检索	☑ 扭转能 35 MD 図 检索	☑ 扭转能 35 MD 図检索	☑ 扭转能 SS MD 図 检索
	۲ میں		۰ ۲			
>	* ¥	*	*	*	*	*
+ + 1 2328	※加标记 夏制 ★ ★ ★ ④ 扭转能 ³ 5 MD □ 检索	添加标记 夏制 ★ ★ ★	添加标记 夏制 ★ ★ ★	添加标记 夏制 ★ ★ ★	添加标记 夏制 ★★★ ④ 扭转能 35 MD 🗟 检索	※加标记 夏制 ★★★ ④ 扭转能 ^{SS} MD 圆 检索

第五步:插件使用指南

我们在平台中内置了多种插件模块(持续新增和优化中),您可以点击"插件"按钮,查看并选择您 需要的插件,并根据插件的操作说明,进行插件的使用



https://stonewise.feishu.cn/sync/PS1JdxdwasmXfbbTdgYcY43Znse

DFT级别扭转能扫描

对输入分子中选定的部分进行dft级别的扭转能扫描,进一步判断分子的二面角合理性

• 第一步:点击"扭转能扫描"插件

在分子生成结果页面对应分子下方,点击"扭转能扫描"的按钮。



选择包含可旋转键的原子或片段,然后点击"确定"提交任务。



• 第二步: 查看结果

分析完成后会发送完成邮件,点击邮件中的链接或者分子卡片上的标识去查看扫描结果。

结果包含每个扭转角对应的势能图,可点击"+"去新增扭转能任务,计算当前分子中其他可旋转键的 扭转能,并且在3D页面下可查看不同势能构象的分子叠合情况。





• 第三步: 查看结果-3D页面

打开单个扭转角的3D页面,选择左上角势能图中的不同构象做分子叠合,选择的构象和全部构象可被 导出。





王志嗣 2328 王志嗣 2328 王志嗣 2328 王志嗣 2328 王志嗣 2328

使用分子动力学模拟复合物的多帧构象,并对蛋白和配体的相互作用计算和分析,帮助您进 一步判断分子的稳定性

• 第一步: 点击"用分子动力学分析蛋白配体相互作用"插件

在分子生成结果页面对应的分子下方,点击"用分子动力学分析蛋白配体相互作用"。



• 第二步:上传参考配体(可选)或点击"运行"提交任务

上传参考配体(可选):请选择有已知活性的分子作为阳性参考分子,有3D构象,而且有正确的氢原 子,并且确保该分子位于目标口袋中,而不是在距离蛋白远的地方。 提交任务:点击"运行"提交基于MD的蛋白-配体相互作用分析任务

© 232	Default ⊿ + 新任务 task_1				日 扭转能扫描 王志斯 2328	35 用分子动力学分析蛋白配体相互作用 🔞 子结构检索 🔥 播件
89						🖽 😑 2D 3D 📑 导出
	● 王志 ^[] 2 ³² 1	e 2	ැම ^{ා ි} 3 ☑	e ∃ 5 1 2328 4 □	炎 用分子动力学分析蛋白配体相互作	用 王志問 ²³²⁸ 、 ×
王志期 232	00000				 * 蛋白质	玉志司 2328
	8 8	3 \$\$	8 8 3	88	≧ 7rpz_complex 替换	
	添加标记 复制 ★ ★ ★	添加标记 复制 ★ ★ ★	溶加标记 复制 🚖 🚖 🚖	源加标记 复制 ★ ★ ★	参考配体 ①	
	山田转能 S MD 回检索	④ 扭转能 ぷ MD 図 检索 2328	□ 扭转能 35 MD 図 检索	山田转能 S MD 园检索	7rpz_2end_ligand	5
	● 5 □	• •		8 选择的分	子自动带入 □	
	****	總 王志MA 2328	總 王志M 2328	*	选择分子或上传sdf文件	点击运行
	添加标记 复制 🚖 🚖 🚖	添加标记 复制 🚖 🚖 🚖	添加标记 复制 🚖 🚖 🚖	添加标记 复制 🚖 🚖 🚖	CH 3	
	⊴ 扭转能 S MD 図 检索	④ 扭转能 🍣 MD 🗔 检索	④ 扭转能 35 MD 🗔 检索	山田转能。S MD 园检索		£5 ^{88,2328}
						取 消 違行

• 第三步: 查看结果

分析完成后会发送完成邮件,点击邮件中的链接或者分子卡片上的标识去查看分析结果。

结果可查看配体的最佳结合构象以及占比,蛋白配体相互作用分析(NCI)结果和RMSD结果,结果页 面右上角可下载轨迹文件和NCI分析数据。





子结构检索(片段溯源) NEW

- 子结构检索可以用于搜索包含特定子结构的专利和文献,帮助您在设计分子过程中规避知识 产权风险。
- 第一步:开启"子结构检索"插件

在分子生成结果对应分子下方点击插件,点击"子结构检索"的按钮。

© 12	Default ⊘ + 新任务 task_1				④ 扭转能扫描 念 用分子动力学分析蛋白配体相互作用 同子结构检索 合 制			
89	♥ 筛选 分子排名前200 找到2000 分子排名前200	1977 @ 2 0	点击按钮进行子结构检索 · 🐵	0.32 ³	e ²³²⁸ 5 □	田 := 20 30 C 导出 @ 6]		
						10000		
	88 E5 2328				8855 1 23 ²⁸	8 E5 2328		
	山田转能 35 MD 园检索	Autorate 26 MD 図 检索	Addition iC And Add Add Add Add Add Add Add Add Add	ANDUANC Leng 合素	山田转能 35 MD 圆检索 王志明 23	山田转能 S MD 圆检索		
				0 II				
	325 188	2320° CCQ.	**************************************	* CO., 23.00	* CO ESM 23	*		
	添加标记 复制 ★★★	☆加标记 复制 ★★★	☆ 添加标记 2 复制 1 ★ ★ ★	添加标记 复制 大大大	添加标记 复制 📩 🛧 🛧	添加标记 复制 ★ ★ ★		
>	□ 扭转能 35 MD □ 检索	④ 扭转能 ぷ MD ◎ 检索 5 № 2328	△ 扭转能 ぷ MD 圆 检索 王志	④ 扭转能 35 MD □ 检索	山 扭转能 S5 MD 园 检索	□ 扭转能 38 MD 圆检索		

• 第二步:选择分子片段进行检索

勾选好插件后,进行片段选择,按住shift用鼠标进行选择对应片段(一次可选择多个分子片段),点 击确定后,填写任务名称后进行检索。

Ø	Default ∠ + 新任务 task_1				王志鄂 2328 山 扭转能扫描	※用分子动力学分析蛋白配体相互作用 同子结构检索 介 播件
80						🗄 😑 20 30 🗋 导出
			e 3 □	€ 4 □ 35 + + + + -	③ 子结构检索 * 项目	√ × 选择子结构 3000000000000000000000000000000000000
	よ。 8 8 8 8 8 8 8 8 8 8 8 8 8	● ● ● ● ● ● ● ● ● ● ● ● ● ●		● ● ● ● ● ● ● ● ● ● ● ● ● ● ● ● ● ● ●	Default * 任务名称 11	
	 通 扭转能 ぷ MD 図 检索 ● 5 	 通接線能 ぷ MD 同检索 ● 6 	 通 扭转能 ぷ MD 図 检索¹³²⁸ ● 7 □ 	 ④ 扭转能 35 MD 図 检索 ● 8 □ 	┃ * 配体 选择分子或上传adt文件	
	A Constant	dana.	and the	and a second		选择子结构后点击确定
>	285 添加标记 复制 ★★★ 回 扭转能 35 MD 圆 检索	288 添加标记 复制 ★★★ G 扭转能 35 MD 圆 检索	改5 添加标记 复制 ★★★ 3375 ④ 扭转能 35 MD 圆 检索	388 添加标记 复制 ★★★ ④ 扭转能 ぷ MD 圆 检索 点	□□□□□□□□□□□□□□□□□□□□□□□□□□□□□□□□□□□□□□	
	© ●	 			主志興 2328	取消

• 第三步: 查看结果

分析完成后会发送站内提醒,点击分子卡片上的标识去查看检索结果。

☆ 分子生成	Default ⊘ + 新任务task_1				④ 扭转能扫描 。8 用分子动力学分析蛋白	配体相互作用 🗟 子结构检索 🖧 插件
即 工作台	♥ 筛选 分子排名前200 ◇ 找到2	_{00个分子} 使用过对应功能的 可直接。	的图标会显示在分子左上 点击图标查看结果	角 王志第 2328		⊞ ≔ 20 3D 🗋 导出
	 ۲ ۲					
	888 添加标记 复制 ★ ★ ★ ④ 扭转能 S5 MD 团 检索	8월8 添加标记 3月 ★ ★ ★ ④ 扭转能 55 MD ③ 检索	88 添加标记 复制 ★★★ GJ 扭转能 S MD 区 检索	88 激加标记 复制 ★★★ GJ 扭转能 35 MD 团检索	888 深加标记 复制 ★ ★ ★ G 田枝龍 S5 MD 団 检索	 総 添加标记 复制 ★★★ ④ 扭转能 炎 MD 同 检索

结果查看中,可以选择<mark>不同的片段</mark>进行查看,结果种类分为<mark>专利和文献</mark>可分别查看。



在文献结果查看中,可直接点击分子下方<mark>DOI号</mark>,进入文献查看



3. 基础操作

分子生成结果筛选

在分子生成结果界面可进行结果筛选

8	Default ∠ + 新任务 task_1	点击筛	选按钮进行纠	吉果筛选	山田韩能归撤 念用分子动力学分析蛋白配件根互作用 同子结构检索 《公播件					
88	♥ 筛选 27 牙排名前200 √ 找到20	0个分子						🖽 🗄 2D 3D 🗋 导出		
	ه مېمېم م ۱۵				· · · · · · · · · · · · · · · · · · ·	00000000000000000000000000000000000000	 ۲ ۵ ۲ ۲ ۵ ۲ ۲ ۵	e -		
	8 ⁸ 添加标记 复制 🛨 🛧	添加标记 复制 ★ ★ ★	88 添加标记 复制 🔬 🛧 🛧	883	③ 添加标记 复制 ★ ★ ★	8 ⁹⁸ 添加标记 复制 📥 📥 📥	③ 添加标记 复制 ★ ★ ★			
	☑ 扭转能 35 MD 図 检索	G 扭转能 Sõ MD 圆检索	□ 扭转能 S5 MD □ 检索	- 日田转能 35 MD □ 检索 - 王	☑ 扭转能 ぷ MD □ 检索	□ 扭转能 Sõ MD □ 检索	凸扭转能 ॐMD 圆检索	☑ 扭转能 35 MD □ 检索		
	* 25 12		• "``` • "`` • "`` • "`` • "`` • "`` • "`` • "``	8 7 7 7 7 7 7 7 7 7 7 7 7 7 7 7 7 7 7 7	ی مرکز (۲) (۲) (۲) (۲) (۲) (۲) (۲) (۲) (۲) (۲)	 № №	\$	 16 16 16 17 18 18 19 10 1		
		添加标记 复制 ↓ ★ ★ ★	添加标记 复制 ★ ★ ★	添加标记 复制 ★ ★ ★	添加标记 复制 ★ ★ ★	添加标记 复制 ★ ★ ★	液加标记 复制 ★ ★ ★			

可以通过结构和分子参数进行筛选

♥ 筛选	分子排名前200 找到200个分子	·洛·士/士长	17年14				🖽 🗄 2D 3D 😂 导出
包含结构	ا	,通过编作	᠈᠃	e 4 🗌	<u>ه</u> 5 🗆	@ 6 🗌	و 7 🗆
2 絵制結构 抑除结构 2 絵形括构	and the second	"too		30 2225 4 4 4 4 4	A State Stat	φα ₀ τα.	and the
寻找相似结构	B	88	8	****	328	8	*
▲ 参考分子	添加标记 复制 🚖 🚖 🚖	添加标记 🔰 复制 🗌 🚖 🚖	添加标记 复制 🚖 🚖 🚖	添加标记 复制 👌 🇙 🌟	添加标记 复制 🚖 🚖 🚖	添加标记 复制 ★ ★ ★	添加标记 复制 🚖 🚖 🚖
分子相似性:	G 扭转能 S5 MD 図 检索	☑ 扭转能 ぷ MD ◎ 检索	☑ 扭转能 35 MD 図 检索	△ 扭转能 35 MD 図 检索	☑ 扭转能 35 MD □ 检索	☑ 扭转能 ぷ MD 図 检索	☑ 扭转能 ぷ MD 図 检索
0 0 100	1328 8 1		10	an 328 ∎	a	a 13	B
BM骨架相似性:	्र्यू	通过参数)			"Ogg	Tran-	
分子量: 0 ● ● ● 1500	*	*	3550 CLL. 8	*	3 ²⁵	*	**************************************
酯水分配系数: −10.0 ● 10.0	添加标记 夏朝 ★★★	添加标记 复制 ★ ★ ★	添加标记 复刻 ★ ★ ★	添加标记 复刻 ★★★	添加标记 复刻 ★★★	添加标记 复制 ★ ★ ★	添加标记 复制 ★★★
氢键供体:	SAL DRIVE SO MULLER TAR	TRI ATTAG BE DO MID. L'OL COM	TT TT A BE OO MO TO TO TO A	TO MERCE OF MULTIPLE	THE THE SO MID LO THE	TRANSF OD MID TRANSF	THE THERE OF MULTIPLE TO THE
0 • • 100 氢键妥体: 3 · · · · · · · · · · · · · · · · · ·	€ 15 *** *** *** *** *** *** ***						
可旋转键:	'H)))	'th	A.	20	'th	Str.
0 0 00	aib or and a second	m 王志斯 2328	ab E	ab	(中) 王志昭 2328	्र को	···· 王志[1] 2328

分子生成任务参数查询

在任务结束后结果查看中可通过以下方式进行查看或者修改

Stone (MINB) AI Default 🧷 \bigcirc 点击任务名称旁" + 新任务 / task_1 创建人: 믿 7 筛选 分子排名前20(创建时间: 2025-04-17 15:01:05 任务ID: 2035 点击任务参数 2.028 30 任务参数 任务信息 移动 删除 X 添加标记 复制 添加标记 复制 △ 扭转能 ³³ MD 回 检索 ☑ 扭转能 ³³ MD □ 检索

点击任务参数后,进入界面可以看到之前输入的相关信息。点击编辑参数可以更改参数重新进行分子 生成。



分子生成循环推荐

在分子生成任务结束后,查看结果的过程中如果有合适的分子可以点击分子左下角图标,以该分子作 为参考重新进行新一轮的分子推荐

©	Default 🖉				① 扭转能扫描 38 用分子动力学分析	蛋白配体相互作用 😡 子结构检索 🖒 播件
	28+新任务 task_1					
89	▽筛选 分子排名前200 ─ 找到2000	☆☆☆ 「白击图标」用已生	成的分子作为参考进行新	行一轮的分子推荐		田 ≔ 2D 3D C 导出
	● 王志勝 2328 1□		(a) 3 () 3 () 3 () 3 () 3 () 3 () 3 () 3		● 王志顺 2328 5 □	● 王志淵 2328 6 □
	点击图标,使用该分子作为参考分子 进行新一轮分子推荐			A 1220		to or or or or
	⑧ 添加标记 复制 250 ★ ★	88 添加标记 复制 🚖 🚖 🛬	⑧ 添加标记 复制 ★★★	 583 添加标记 复制 ★★★ 		8 8 1 1 2 1 2 1 2 1 2 1 3 3 ★ ★ ★
	④ 扭转能 35 MD 圆 检索	④ 扭转能 ぷ MD 圆 检索	□ 扭转能 35 MD □ 检索	☑ 扭转能 35 MD 図 检索	□ 扭转能 35 MD 圆检索	□ 扭转能 35 MD □ 检索
	9 <u>7</u> 8 @ 7	8		ee		
	add		12 ==		5.5 M 2.5 M	The second se
	228 \$	**************************************	線 末志的2328	8 x 5 1 2328	後 家 王志勝23	28 8
	添加标记 复制 ★ ★ ★	添加标记 复制 ★ ★ ★	添加标记 复制 🚖 🚖 🚖	添加标记 复制 ★ ★ ★	添加标记 复制 🚖 🚖 🚖	添加标记 复制 ★ ★ ★
>	G 扭转能 S5 MD 図 检索	G 扭转能 S MD 🕞 检索	G 扭转能 ぷ MD 🕞 检索	④ 扭转能 ぷ MD □ 检索	G 扭转能 ぷ MD □ 检索	G 扭转能 ぷ MD 図 检索

插件补充使用(仅限扭转能和片段溯源)

如果分子已有扭转能扫描或者子结构检索结果,想对分子中的其他片段补充分析,可以在该分子的结 果页面中,点击"+"图标补充片段和提交任务。



3D模式中插件补充使用(仅限扭转能和片段溯源)

点击分子卡片左上角 "3D" 图标进入3D模式



在界面左上角点击对应图标进行对应功能使用



a.扭转能:点击扭转能扫描创建任务,进行更精细化的DFT精度计算



b.子结材	勾检索				

<u>ж бор 328</u> 5					1 2D 3D
reference ligand &	100 1328	ES IN 2328			
	王志鹏 2328	选择子结构	王志 m Loze ×		
	点击子结构检索图标后标记分子片段进行检索			王志聞 2328	
E志開 ²³²⁸ 2	王志鹏 2320	550 222 × V			
HO. ANY ANY		но 1338 王志斯 2328		王志罰 2328	
王志鹏 ²³²⁸ ³ 平		王志開 2328			
		取消 确定			
		王志開 2328 王志開 2328			
2328 + ⁴					

4. 注意事项

- 1. 上传的蛋白文件必须是蛋白-配体复合物,否则无法定位口袋
- 2. 【高级选项】如果上传参考分子,分子需要在蛋白口袋里,有3D构象,而且有正确的氢原子
- 3. 【高级选项】选择要保留的片段时,不要切断双键或三键,不要破坏环结构
- 4. 【高级选项】标记正确的NCI信息有助于得到更好的生成结果,需要标记在口袋原子上
- 5. 【高级选项】如果您上传配体后并没有标记片段,那么上传的配体在生成过程中仅参考位置
- 【高级选项】如下图,如果您选择使用电子云密度提升生成分子的效果,请务必保持上传蛋白的完整性,否则会导致任务失败

R:	Default 切换项目						
	+ 新任务 task_1	task_2					
82	*蛋白配体复合物 ①		提示:选择口袋 🚺	12 ³²⁸	蛋白质	参考配体	
	7rpz_complex.pdb	替换删除	٤		(3	
	级别 ①		F 市 M 2320 日		1 State		
	标准 高级	尊享	王志		10-0-1	王志照 2828	
	高级设置 💽				- A AN		
	重宜 (1) (1) (1) (1) (1) (1) (1) (1) (1) (1)		王志聯 2328	确保蛋白完整	Le total		
	蛋日质	BC1 4		an 7328		5 / 100 28	
	7RPZ	₹.5.ms	王志				
	NCI (怎样去标记NCI?)	J	王 漸關 2328			10.22 ⁻²	
	·氢键供体:				1		
	在右侧口袋里标记原子	🖌 清空	王志	4 2 ³²⁸	王志鹏 2328	王志鹏 2328	
	·氢键受体:				开始生成		
	在右侧口袋里标记原子	🧎 清空			Elon		

王志県²³²⁸王²8</sub>王元²³²⁸王志県²³²⁸王志県²³²⁸

5. 常见问题

1. 如何停止任务

如果您在任务生成过程中想要立刻停止任务,直接将任务删除即可。删除后,任务将自动停止

Stone		23 ¹⁸ IS	m 2328	王志四 2328	王志聞 ²³²⁸
\heartsuit	Default 切换项目 + 新任务 task_26	•			
82	♥ 筛选 分子排名前5万	创建人:liyulong@stonewis 创建时间:2024-11-08 17:	e.cn 54:02		
	@	任务ID: 513 任务参数 重新命名	s ²³²⁸ 2 □	@ []	I. I
	out		w	à	
				王志鹏 2328	\sim

2. 上传了reference ligand并标记了想要保留的片段,生成分子为空

reference ligand不在口袋里,分子在原位优化被过滤掉了,上传reference ligand时需要确保有3D构象,并且在口袋里

3. 下载的文件中Extended_Library 和 Library 有什么区别?

- Extended_library.sdf: 生成的分子经过QED、SAS过滤后,排除含有罕见片段、极性原子 互斥以及二面角势能>2kcal/mol的分子,保留覆盖用户标记的NCI数量较多和杂原子利用度较高的 分子。然后根据电子密度格点打分和基于力场的原位优化后构象的口袋契合度打分(Pocket Matching Score)对分子进行过滤,直到剩下分子数量50%的分子进入Extended Library,分子 个数为最多5w。
- library.sdf:在Extended Library继续根据电子密度格点分数和Pocket Matching Score分数 对分子进行过滤直到剩下3k分子,然后根据BM InChiKey做去重处理,每类选出综合Pocket Matching Score最好的一个分子形成library。

4. 目前的生成模型对哪一类的口袋表现较好?

- 我们的模型对于如下口袋的表现可能较好:
 - volume/SASA 在3.8附近
 - Hydrophobic Fraction 在64%附近

5. 上传PDB文件后,没有PDB号,这种情况对分子生成结果的影响怎样?

会对分子生成的精度有影响。理论上如果包含实验电子密度文件,生成分子的效果相对会更加完善。 按照目前的产品设计,PDB号是用来下载实验电子密度文件的索引,实验电子密度文件会用在分子生 成的流程当中。例如大模型的prompt,说的越详细,产生的效果就越好