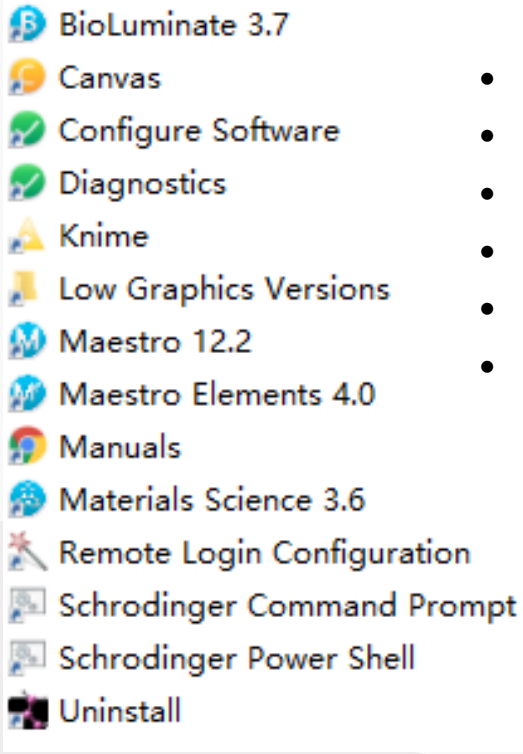
# Schrodinger Chinese manual
# 薛定谔使用基本教程

薛定谔安装教程：
http://library.shanghaitech.edu.cn/3986/list.htm

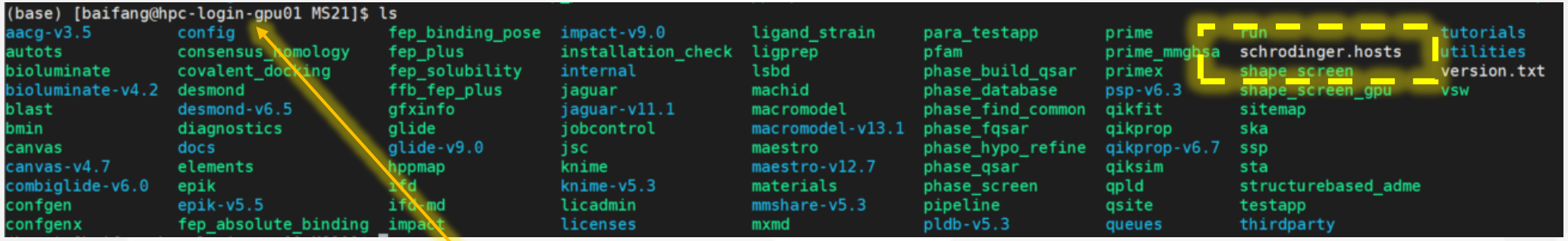
Schrodinger图形界面工具




- Bioluminate 绘图及调用部分软件包（蛋白蛋白对接等）
- Maestro 最主要的计算生物学工具集
- Knime 自定义薛定谔workflow、pipline
- Canvas 化学反应预测及化学反应数据库构建
- Configure 安装薛定谔license
- Diagnostics 当你需要联系薛定谔技术支持时，用这个来生成诊断信息

本地使用：　薛定谔安装教程：
http://library.shanghaitech.edu.cn/3986/list.htm

集群使用：　安装完成后，需要修改安装目录下的schrodinger.host文件



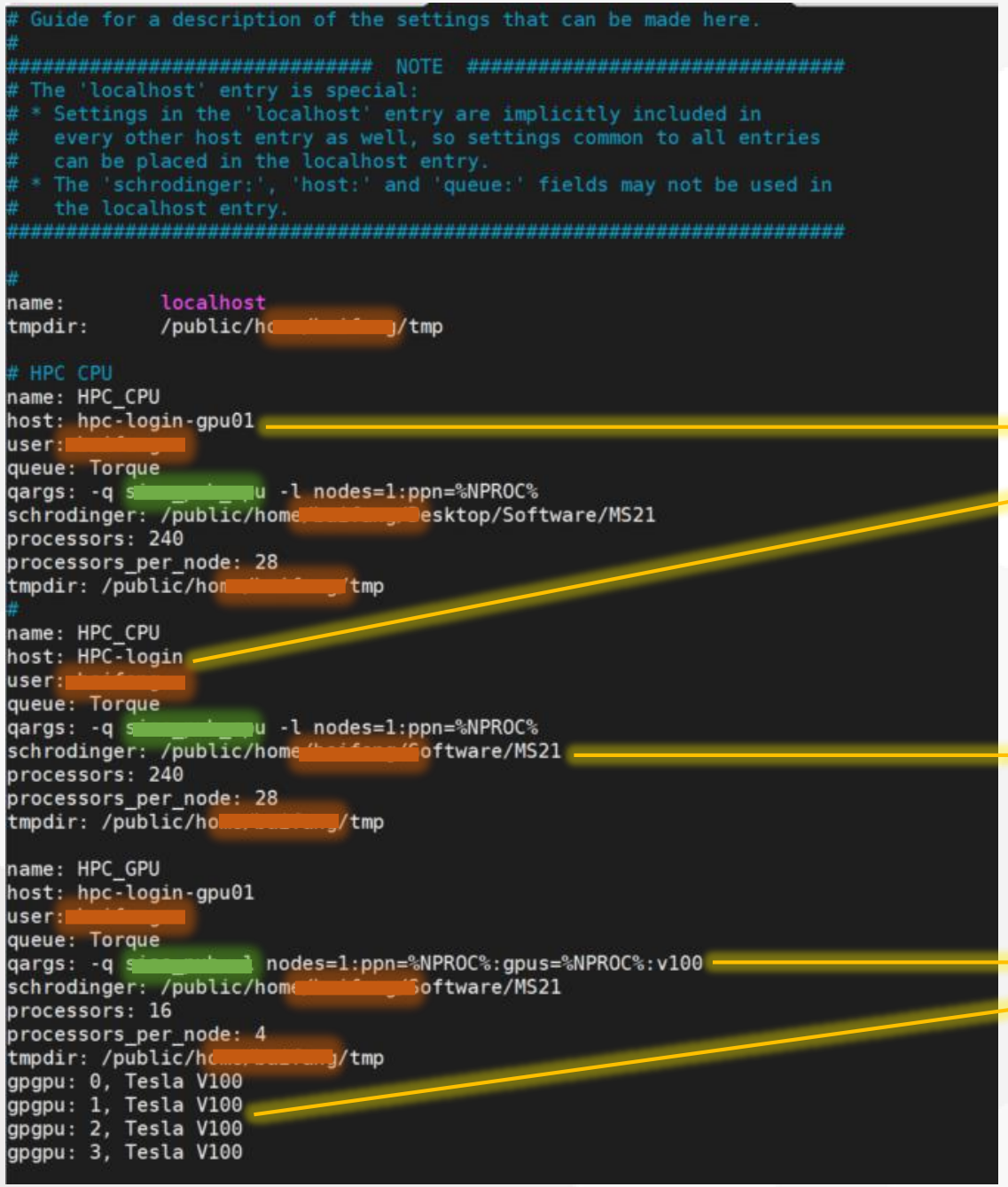

在Host文件中添加信息：

**CPU队列**

name: HPC_CPU
host: hpc-login-gpu01（登录节点）
user: 用户名
queue: Torque
qargs: -q 队列名 -l nodes=1:ppn=%NPROC%
schrodinger: 自己的薛定谔安装路径
processors: 240
processors_per_node: 28
tmpdir: 自定义临时文件路径

**GPU队列**

name: HPC_GPU （名字可以随便起）
host: hpc-login-gpu01（登录节点）
user:用户名
queue: Torque
qargs: -q 队列名 -l nodes=1:ppn=%NPROC%:gpus=%NPROC%
schrodinger:自己的薛定谔安装路径
processors: 16
processors_per_node: 4
tmpdir: 自定义临时文件路径
（显卡类型和数量要跟随你使用的GPU节点来更换）
gpgpu: 0, Tesla V100
gpgpu: 1, Tesla V100
gpgpu: 2, Tesla V100
gpgpu: 3, Tesla V100




最终示例Host文件：

队列名

用户名

登录节点

安装路径

当使用v100系列节点

# Maestro基本界面

Project名称： Scrath Project即临时Project

通过各种方式选择特定的一组原子或扩充选定的原子： ASL expression

Style： 调整所选中的原子的展示方式，蛋白的cartoon形式

TABLE 展示每个entry的详细信息

TASK面板， 显示可用APP

可控制鼠标点选后是增加选中还是取消选中

可控制鼠标点选选中的内容，ATOM 还是Residue等

Project Table

这里会展示你workspace里的东西

在这里调整视角，整体视角、配体视角或选中的视角（focus在什么上）

Build： 调整结构，画分子，修改键长键角，添加Fragment等

Preset： 设置调整workspace时自动应用哪些设置，如自动focus到配体

Monitor 展示你每个job的信息

一系列你添加星号的app

动力学轨迹面板（默认不调出）

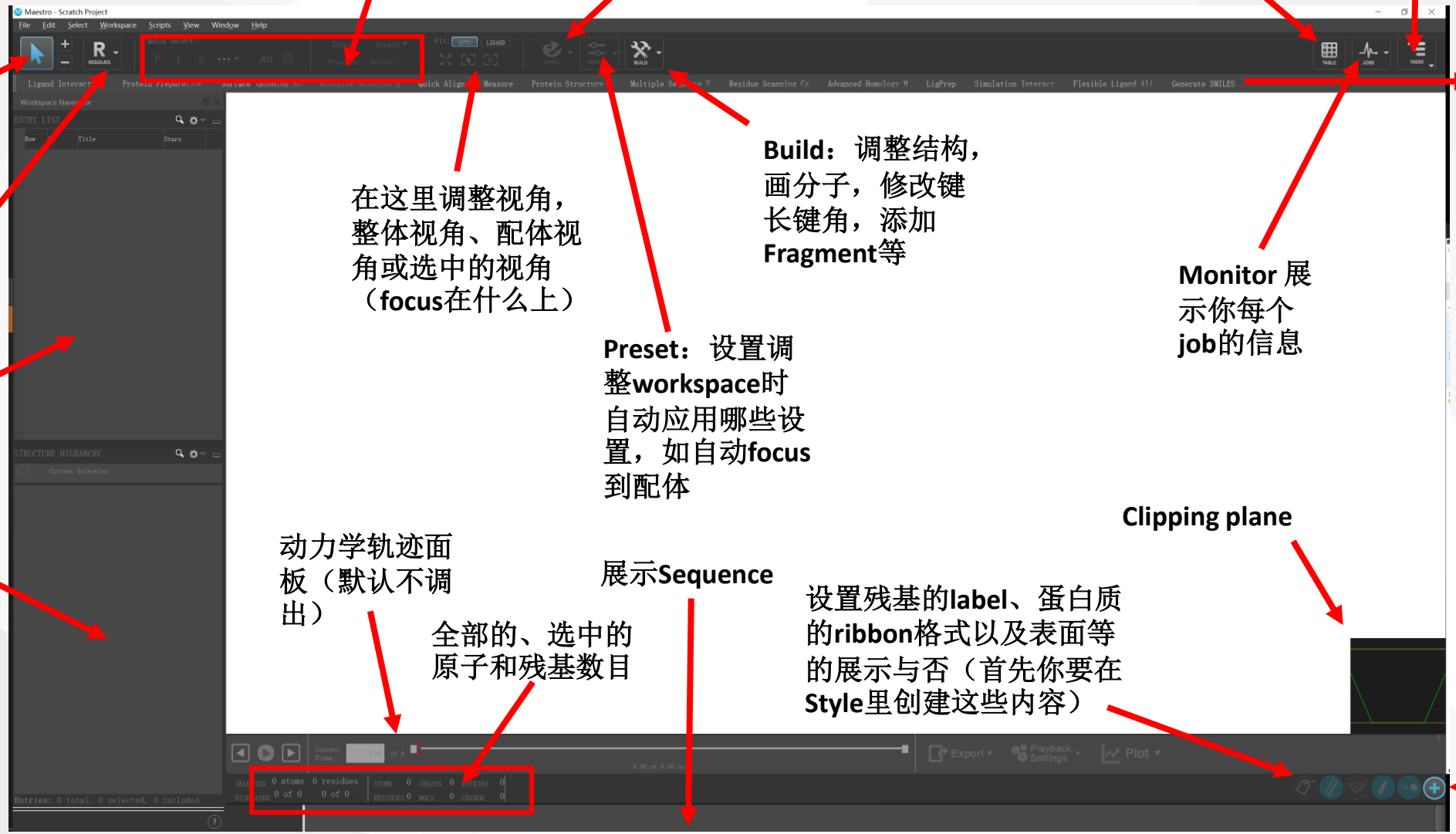
全部的、选中的原子和残基数目

展示Sequence

设置残基的label、蛋白质的ribbon格式以及表面等的展示与否（首先你要在Style里创建这些内容）

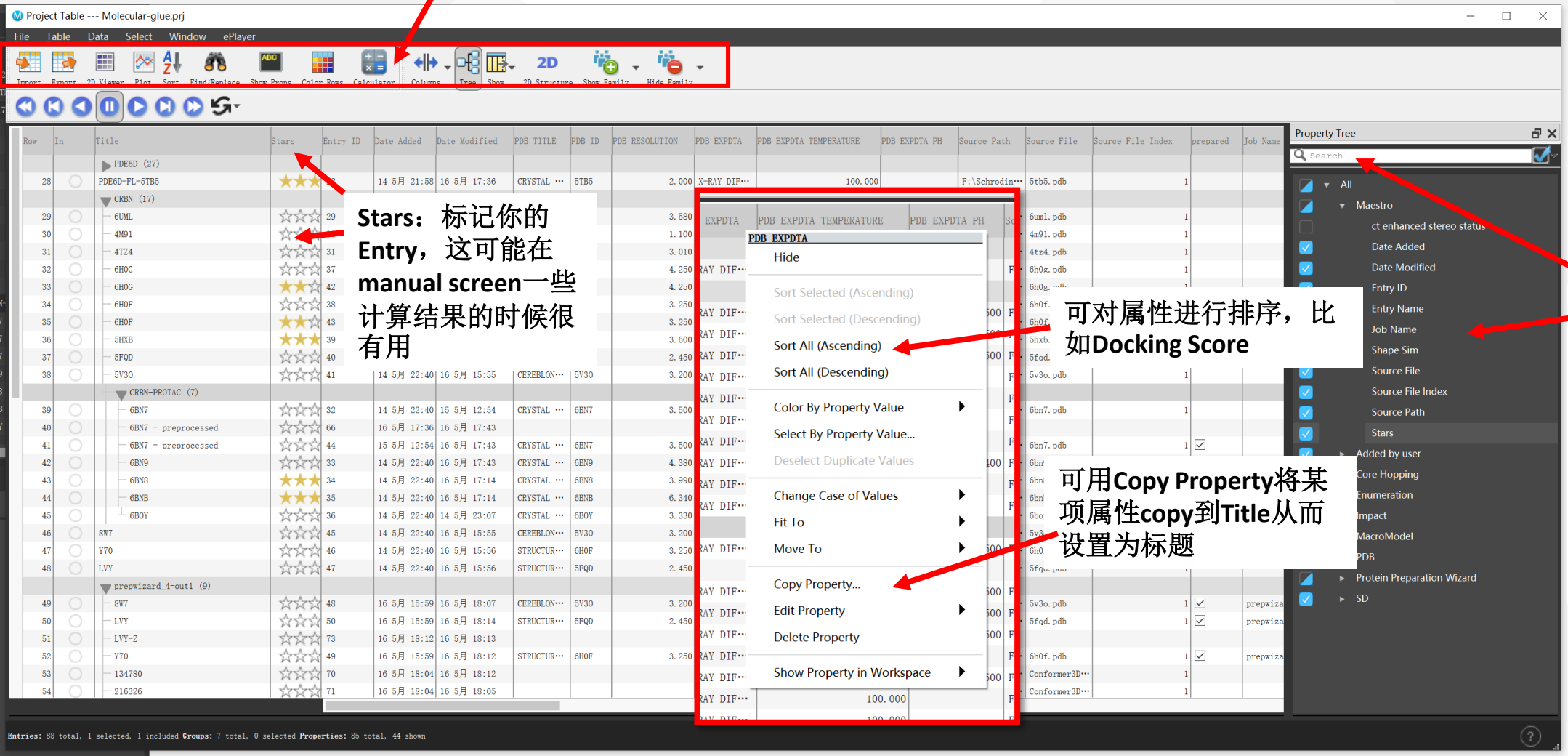
Clipping plane

设置整体设置，如是否展示左边的Project table、是否展示小分子2D结构等



# Table： Project Table中不同Entry的详细信息

这些功能有时候会用到，比如sort，比如plot，比如2D viewer（概览选中的Entry的二维结构，在看一些小分子的共性的时候很有用），再比如Find（可以寻找一些特定Entry）



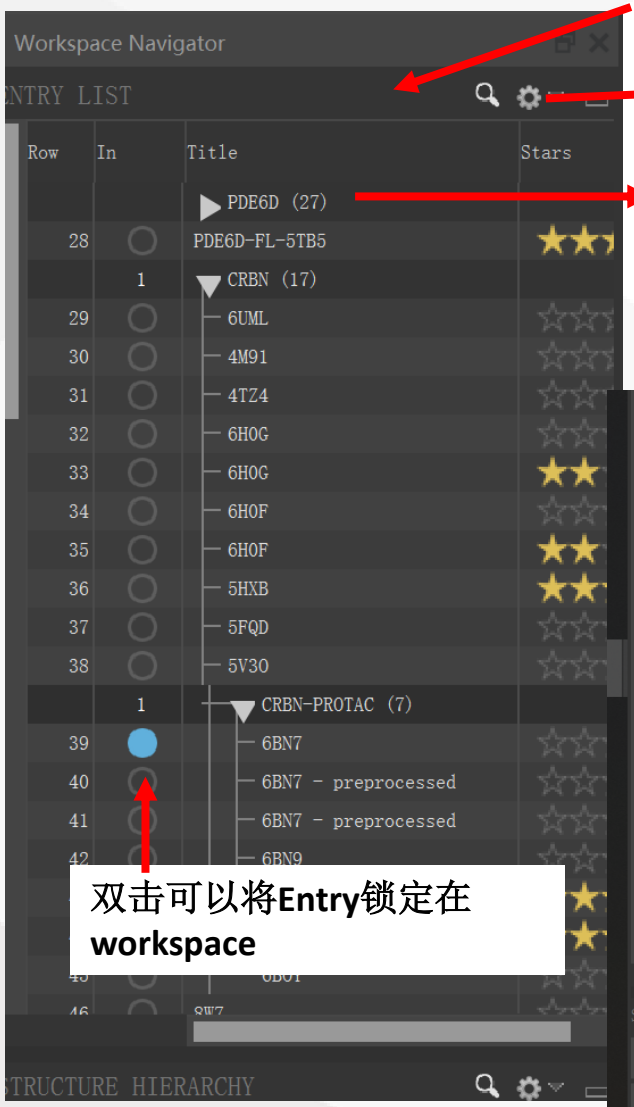

**Stars：标记你的Entry，这可能在manual screen一些计算结果的时候很有用**

可对属性进行排序，比如Docking Score

可用Copy Property将某项属性copy到Title从而设置为标题

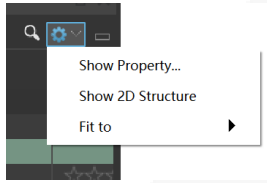
所有Entry具有的所有属性，一般可以查看薛定谔计算结果中不同app返回的不同属性，如glide产生的Docking score

# 主界面Project Table---Workspace Navigator的使用



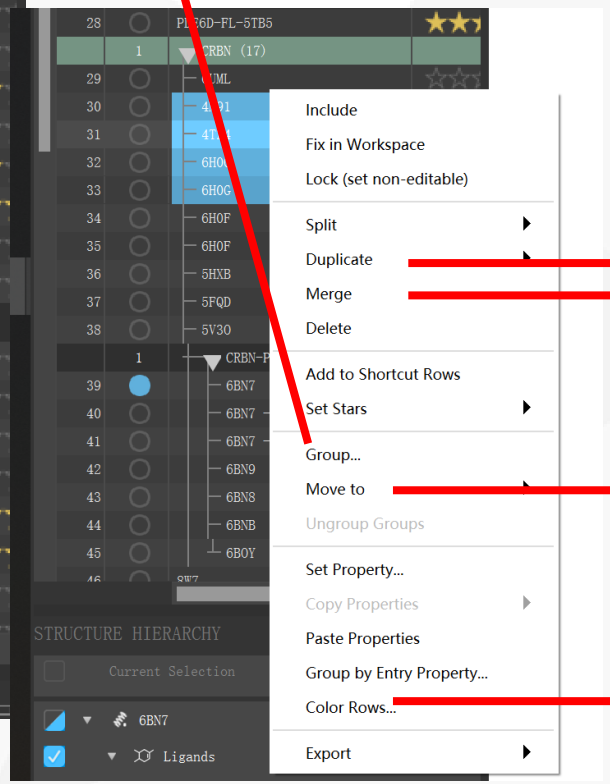

搜索Entry

可以调节显示的column




可以进行分组

双击可以将Entry锁定在workspace

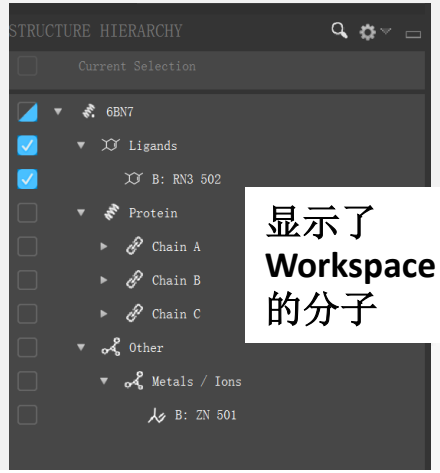



复制Entry

合并Entry（如将小分子和蛋白合并成一个复合物）

移动Entry

给Entry加特定颜色，另一种标记法（Stars比这个更简单些）




显示了Workspace中有的分子

显示了总Entry的数据，选中以及include（在workspace中显示的）的Entry的数目

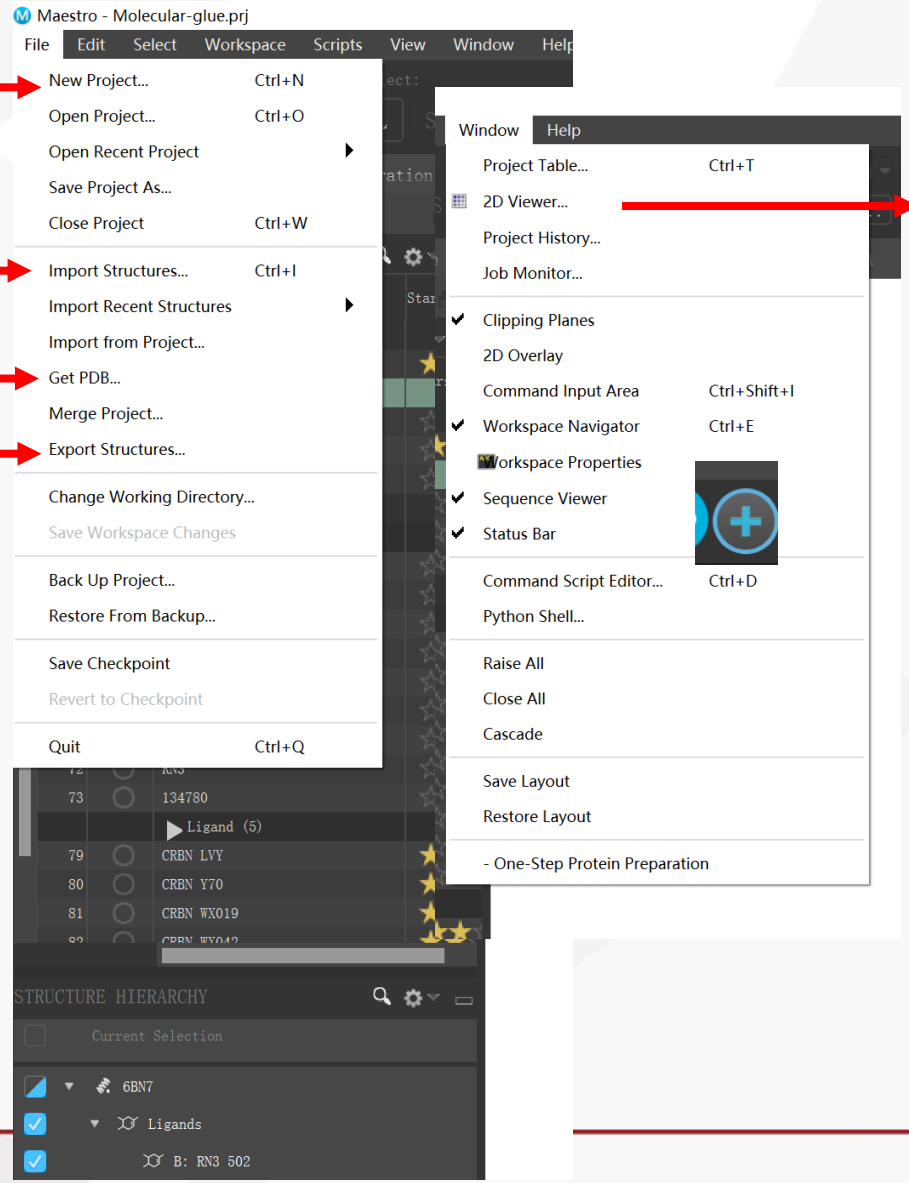
# 主界面选项卡

新Project建立

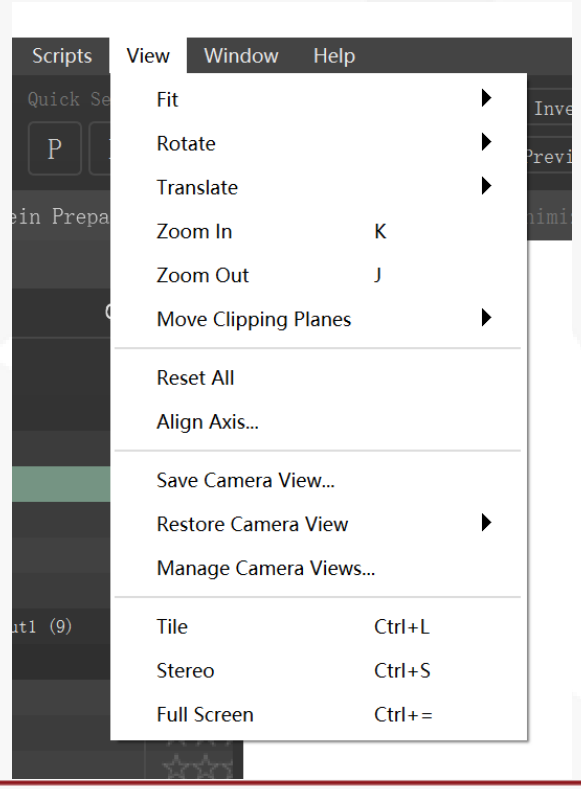
导入结构

获取PDB 需要PDB ID

导出结构




打开2D viewer看小分子分子式



# 工具栏

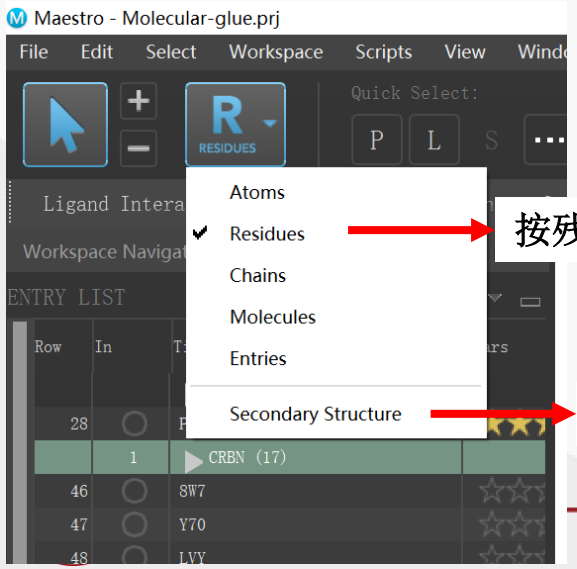

显示选定的结构

化学展示方式

设置Label

展示多少H

给蛋白加Ribbon形式




按残基来选择

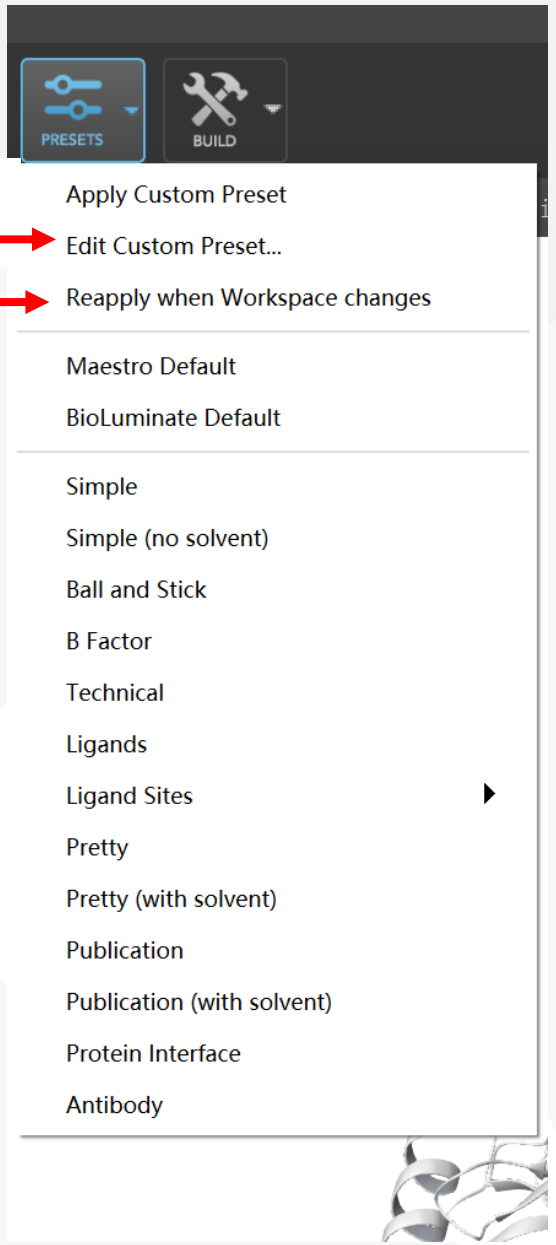
选择一段二级结构


复制当前Entry

给原子加减电荷

改换原子类型

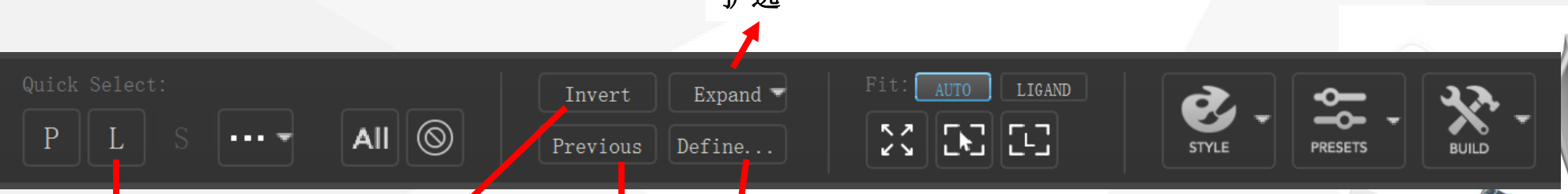
移动或旋转选定的结构




编辑Workspace预设设置

启用预设

# Workspace中的分子操作

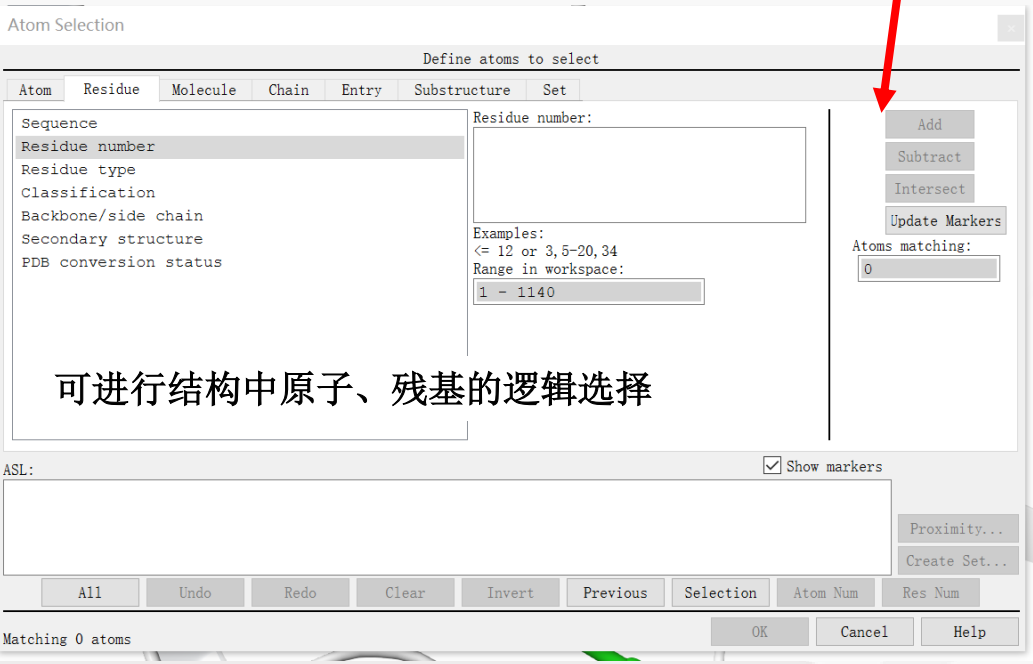



扩选

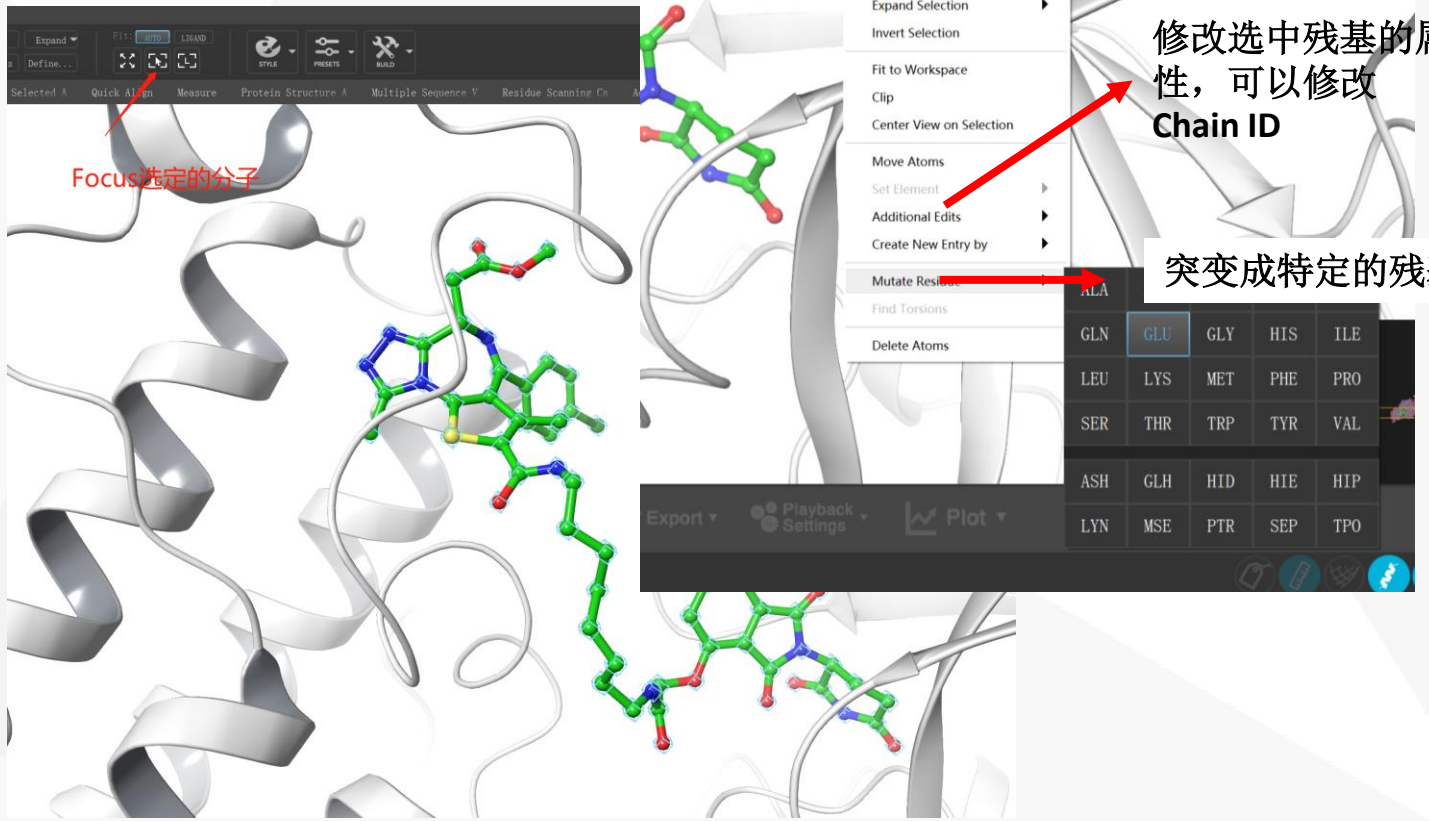
快速选择配体

反选

之前的选择



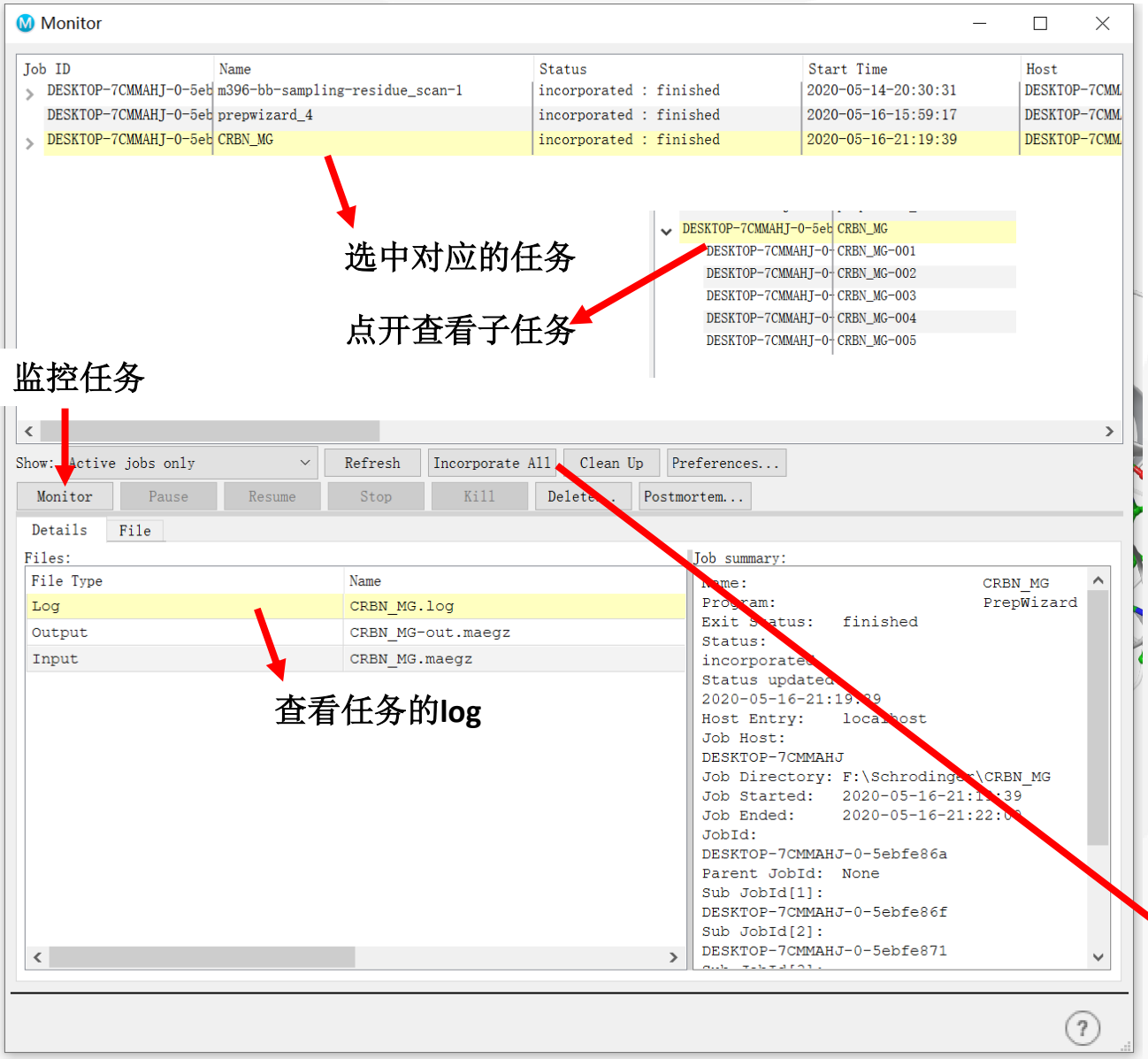

可进行结构中原子、残基的逻辑选择

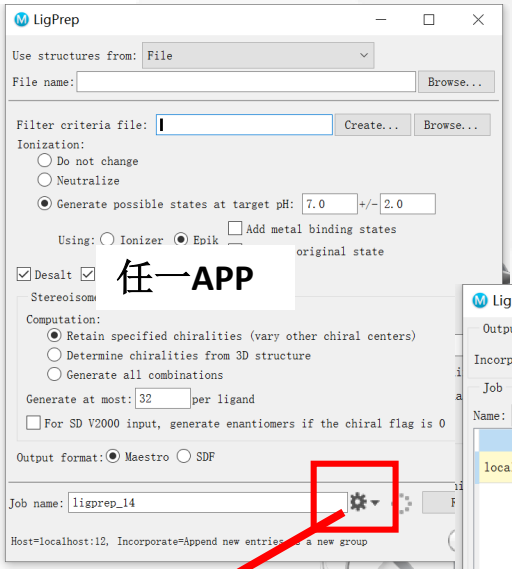


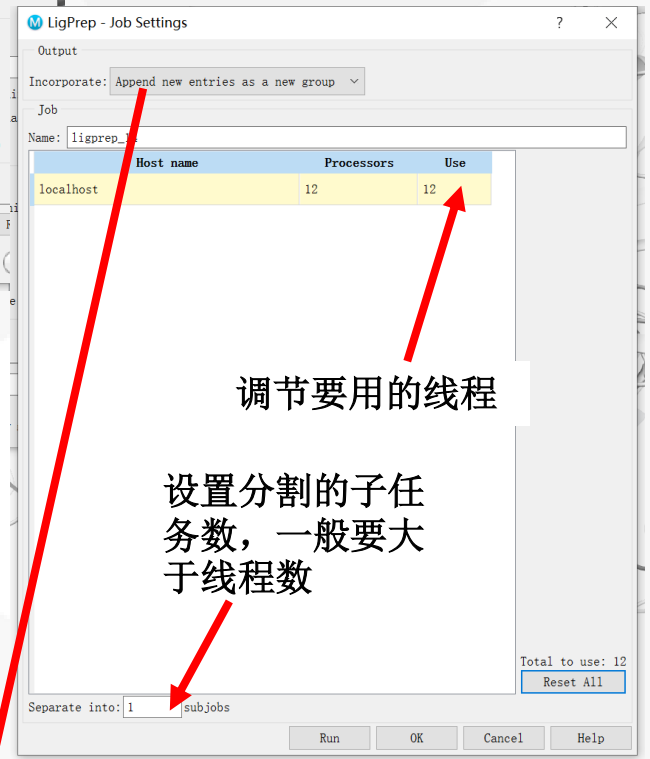

修改选中残基的属性，可以修改 **Chain ID**

突变成特定的残基

# Monitor：jobs监控面板

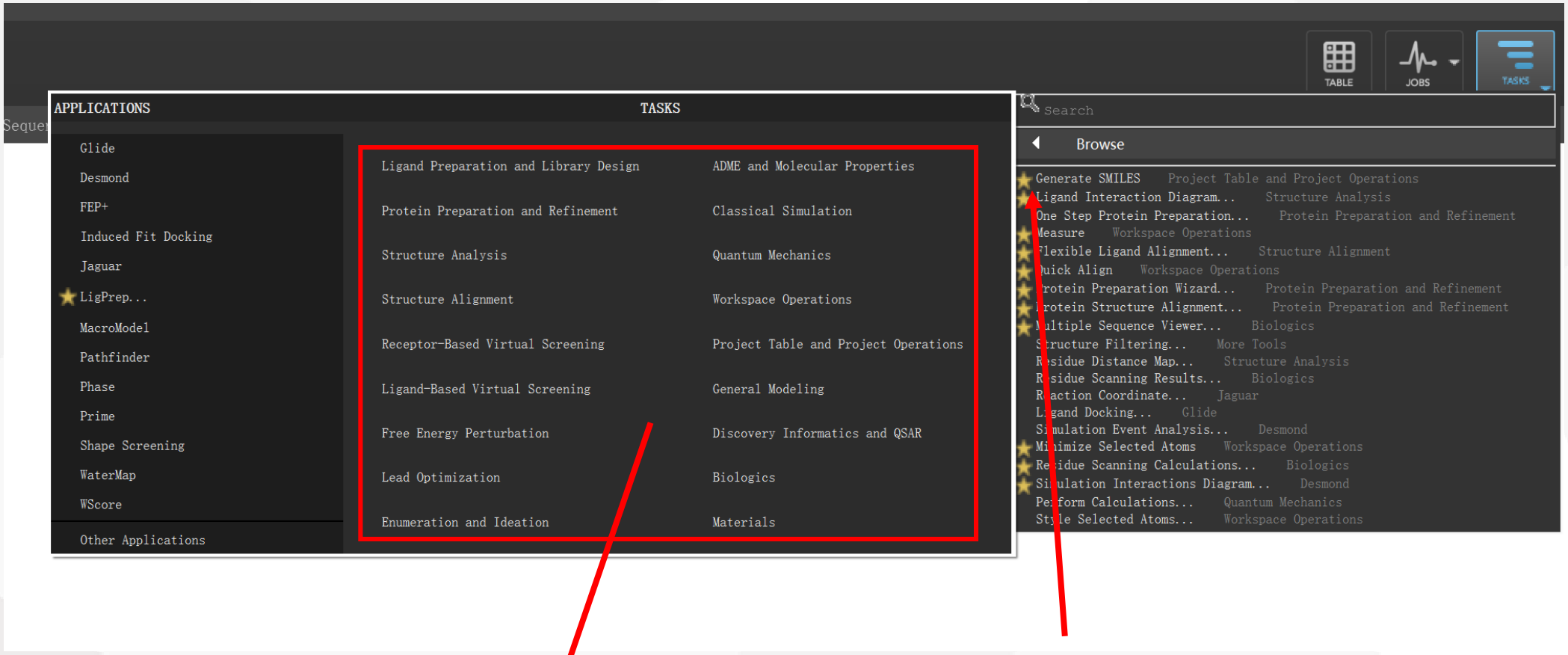



将做完的任务导入Project
必须在任务执行时选择 incorporate

# TASK：Schrodinger的所有工具




众多不同用途的APP集合

加星号，可将APP固定在主界面，可以固定一些常用APP，如Sequence viewer（看序列，做多序列比对等）、Measure（测量原子之间的距离或二面角）、Ligand Interaction（可以画二维分子，比Chemdraw好用）以及Protein Structure alignment和Flexible Ligand Alignment

# Schrodinger Ligand library设计



TASKS
Ligand Preparation and Library Design

*2D to 3D Conversion*
- LigPrep...

*pKa Prediction*
- Empirical pKa...
- Quantum-Mechanical...

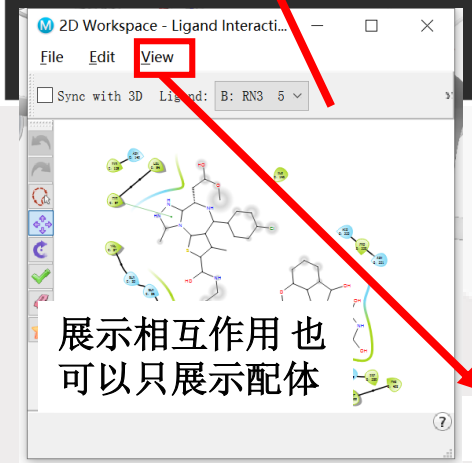
*Structure Building*
- 2D Sketcher...

*Databases*
- Generate Phase Database...
- Manage Phase Database...

*Property Prediction*
- Ligand-Based ADME/Tox Prediction...

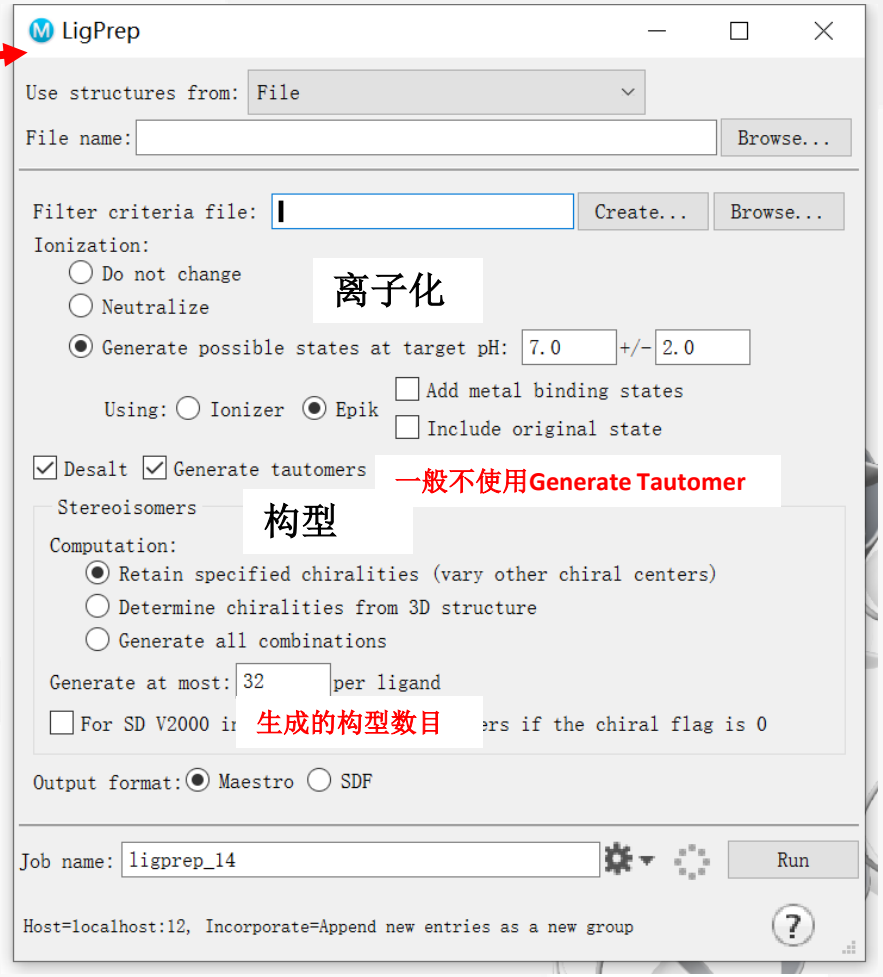
*Other*
- Ligand Filtering...
- Compare Ligand Files...
- Force Field Builder...
- Enumeration

经典配体准备




展示相互作用 也
可以只展示配体

可以调整view的角度和方向




离子化

构型

一般不使用Generate Tautomer

生成的构型数目

# Schrodinger 蛋白结构处理



TASKS
Protein Preparation and Refinement

*Protein Preparation*
- Get PDB Structure...
- Protein Preparation Wizard...
- One Step Protein Preparation...

*Homology Modeling*
- Homology Modeling...

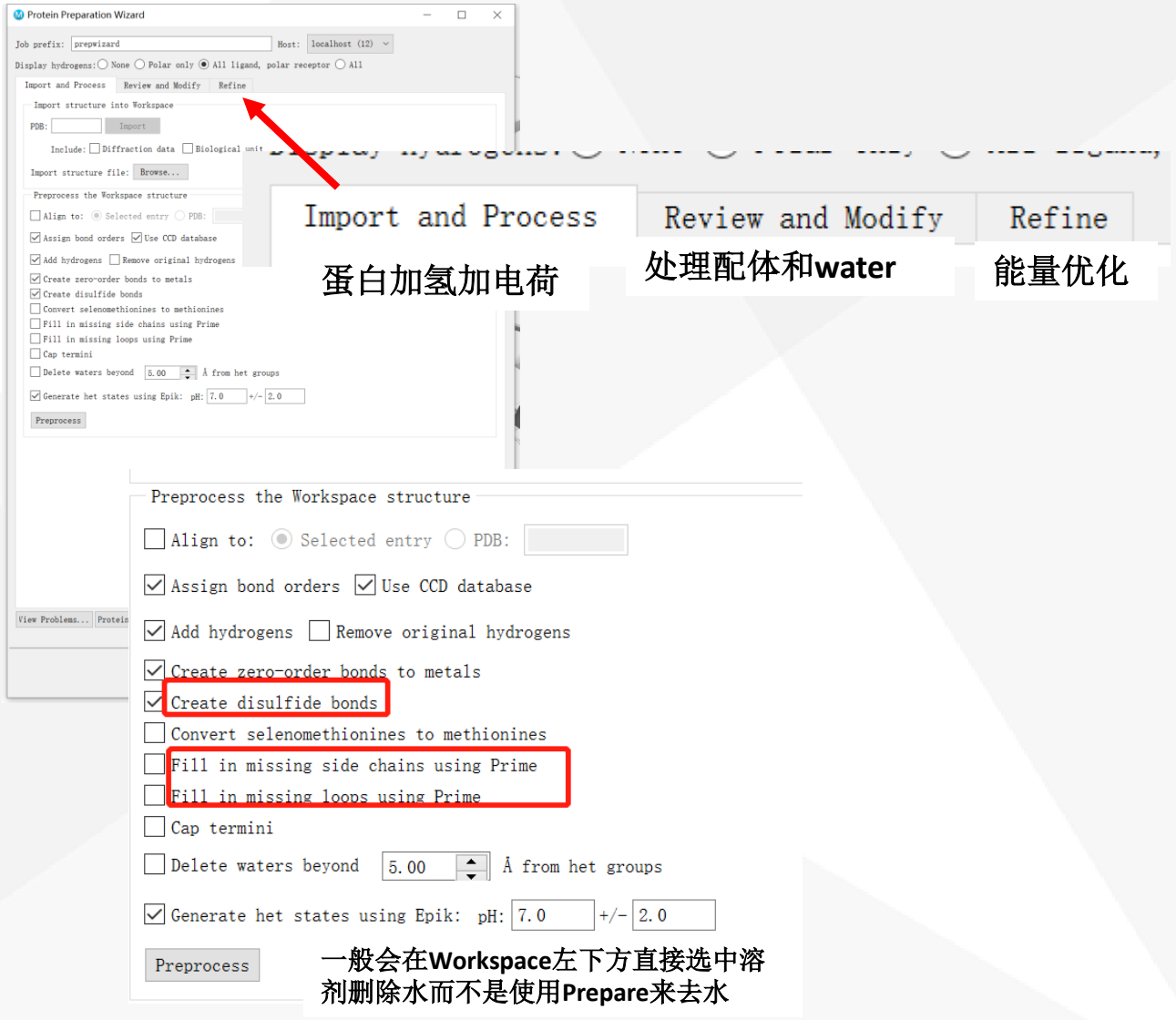
*Protein X-Ray Refinement*
- Protein X-Ray Refinement...

*Protein Refinement*
- Calculate Energy...
- Minimize...
- Minimize as Rigid Body...
- Predict Side Chains...
- Refine Loops...
- Hybrid Monte Carlo...
- Refine Protein-Ligand Complex...

*Protein Alignment*
- Protein Structure Alignment...
- Binding Site Alignment...

*Structure Building and Editing*
- Protein Splicer...
- Mutate Residues...
- Build Peptide from Sequence...
- Generate Helices...
- Helix Manipulator...
- Structure Morpher... 变构
- Assign GPCR Generic Numbering...
- PDB Name Assignment
- Renumber Proteins by 3D Alignment...

*Sequence Editing*
- Multiple Sequence Viewer...



# Schrodinger 基于结构的药物筛选



TASKS
Receptor–Based Virtual Screening

*Docking Preparation*
- Receptor Grid Generation...

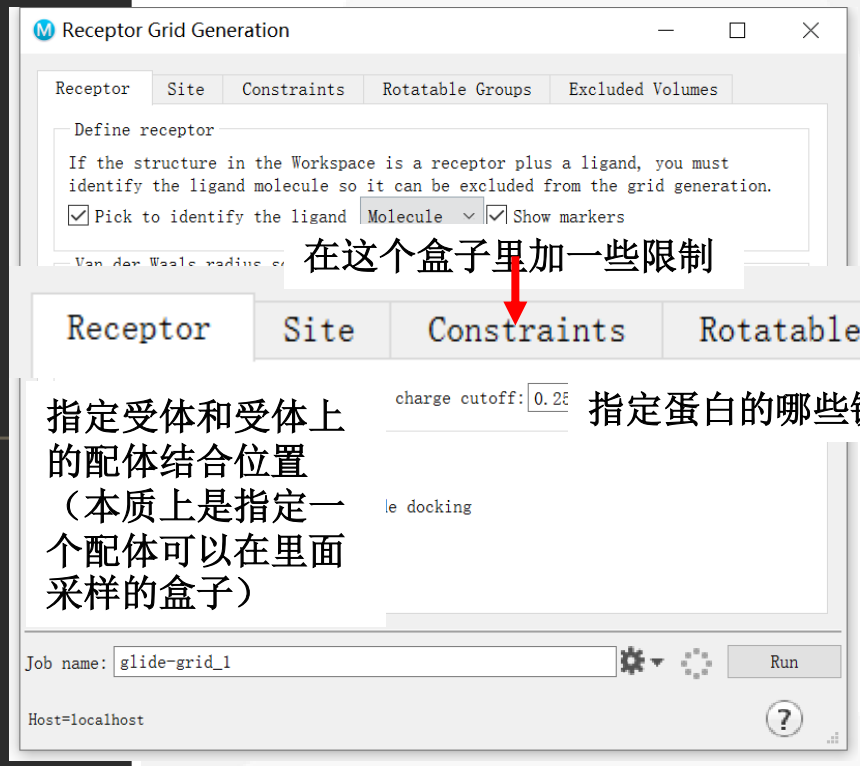
*Docking*
- Ligand Docking...
- Virtual Screening Workflow...
- Covalent Docking...
- Induced Fit Docking...
- Binding Pose Metadynamics...

*Other Docking Workflows*
- QM-Polarized Ligand Docking...
- Cross Docking...
- One-Step Ligand Docking...
- Interactive Pose Prediction...

*Docking Post Processing*
- Pose Viewer...
- Select Top Poses...
- Filter Docked Poses...
- Pose Explorer...
- Visualize XP Interactions...
- Enrichment Calculator...
- Strain Energy Rescoring...

*WScore*
- Model Generation...
- Docking...
- Visualizer...

*Fusion Methods*
- Data Fusion...



# Schrodinger 高级功能辅助分子对接