# Article information:

Hic Sunt Dracones: Molecular Docking in Uncharted Territories with Structures from AlphaFold2 and RoseTTAfold | Journal of Chemical Information and Modeling  
<https://pubs.acs.org/doi/abs/10.1021/acs.jcim.2c01400>

# Article summary:

1. AlphaFold2和RoseTTAfold在蛋白质结构预测方面表现出高精度。

2. 在基于结构的虚拟筛选中，需要准确预测结合位点。

3. 使用实验代用配体复合物通常优于同源模型，但AlphaFold2结构在低序列相似性时表现相当。

# Article rating:

Appears moderately imbalanced: The article provides some useful information, but is missing several important points or pieces of evidence that would be required to present the discussed topics in a balanced and reliable way. You are encouraged to seek a more balanced perspective on the presented issues by exploring the provided research topics and looking at different information sources.

# Article analysis:

作为一篇科学论文，该文章提供了对蛋白质结构预测和分子对接的实验结果和分析。然而，在批判性分析方面，该文章存在以下问题：

1. 潜在偏见及其来源：文章没有明确说明作者是否有任何潜在的利益冲突或偏见。此外，由于该研究是由德国约翰内斯·古腾堡大学的研究人员进行的，可能存在地域性偏见。

2. 片面报道：文章只考虑了66个目标蛋白质，并且这些蛋白质都有已知的配体。这种选择可能导致样本不足或者选择偏差，从而影响结论的普适性。

3. 无根据的主张：文章声称使用实验代用品-配体复合物通常优于同源模型，但没有提供充分的证据来支持这一主张。此外，该主张也忽略了同源模型可以通过多种方法进行改进和优化。

4. 缺失的考虑点：文章没有考虑到其他因素可能会影响分子对接结果，例如水溶液中的离子强度、pH值等环境因素。

5. 所提出主张的缺失证据：文章没有提供足够的数据来支持其结论。例如，在许多情况下，ROC曲线下面积值波动较大，并且需要测试多种组合才能得出可靠结果。这表明作者需要更多数据来支持他们所提出的建议。

6. 未探索反驳：文章没有探讨其他可能解释结果差异或者与之竞争的理论观点。

7. 宣传内容：尽管该研究并未涉及任何商业产品或服务，但是它仍然可以被视为某些技术或方法（如AlphaFold2和RoseTTAfold）推广和宣传。

8. 偏袒：文章似乎倾向于使用实验代用品-配体复合物而不是同源模型，并且没有充分探讨两者之间优劣势。

9. 是否注意到可能风险：文章没有探讨任何潜在风险或限制条件，例如使用同源模型时可能存在误差或不确定性等问题。

10. 没有平等地呈现双方：文章似乎更关注AlphaFold2和RoseTTAfold等新技术，并将同源模型视为次要选择。然而，在某些情况下，同源模型仍然可以提供可靠且准确的预测结果。

# Topics for further research:

* Potential bias and its sources
* One-sided reporting
* Unsupported claims
* Missing considerations
* Lack of evidence for proposed claims
* Unexplored counterarguments

# Report location:

<https://www.fullpicture.app/item/ece3b280e32e2e0ac2d5672e56e0eadf>