

Prep Docking Vina P

Input / Output

Input: .smi

Output:

- .sdf generado con openbabel
- .pdbqt generado con openbabel
- .txt con el listado con de las moléculas generadas en formato .pdbqt

Instalación de Vina

Para instalar vina en linux

1. Instalar autodock4

```
sudo apt install autodock
# llamar autodock
autodock4
```

2. Instalar autogrid4

```
sudo apt install autogrid
# llamar autogrid
autogrid4
```

3. Instalar autodock tools

- Consultar la página web, descargar únicamente el visualizador
 - [Download AutoDock4 – AutoDock](#)
 - <https://ccsb.scripps.edu/download/532/>
- Descargar el archivo en Downloads

```
# descomprimirlo en lugar de preferencia
tar -xvzf mgltools_Linux-x86_64_1.5.7.tar.gz -C /home/jarv11/share/apps

# cambiar directorio a
cd /usr/local/MGLTools-1.5.6/bin
```

```
# ejecutar mgltools
sudo ./pmv
```

Tutoriales:

[How to Install Autodock, Pymol in Ubuntu linux - YouTube](#)

[Instalación Autodock4 y MGLTools en linux \(Solución no aparece icono\)](#)

Docking Varios Ligandos VINA

1. Documentos

1. Dentro de una misma carpeta:

- Ligandos en formato .pdbqt
- Proteína en formato .pdbqt
- Script bash .sh
- Archivo configuración en .txt

Script para bash (.sh):

```
#!/bin/bash
# se puede modificar 'ligand_' por algun otro nombre clave
for f in ligand_*.pdbqt; do
    b=`basename $f .pdbqt` #nota: puede suceder error por el tipo de
comillas, cuidado
    echo Processing ligand $b
    mkdir -p $b
    # 'conf_vs' es el archivo de configuracion
    vina --config conf_vs.txt --ligand $f --out ${b}/out.pdbqt --log
${b}/log.txt
done
~
```

Archivo de configuración (.txt):

```
# nombre del receptor
receptor = 1_electro_patch.pdbqt

# Coordenadas de la caja
center_x = 6.69
center_y = 81.01
center_z = 0.57
```

```
# Tamaño de la caja
size_x = 40
size_y = 40
size_z = 40

#chechar

# Numero de conformeros
num_modes = 1
```

2. Metodología

[Cribado virtual. Paso a paso usando VINA y Bash Scripting](#)

1. Crear directorio para hacer docking
2. Mover ligandos en formato .pdbqt
3. Crear archivo .sh para correr docking

```
mkdir nombrecarpeta
cd nombrecarpeta
cp /ruta/carpeta/ligandos/*.pdbqt . #copia los ligandos .pdbqt a la carpeta
actual
vi run.sh #abrir un archivo nuevo
#pegamos el script de arriba

# Dentro del archivo creado
# 1. Teclear I para poder insertar texto
# 2. Pegar el script .sh
# 3. Teclar Esc
# 4. Teclear ':w' # esto guardara el archivo
# 5. Teclear ':q!' # salir del archivo
```

4. Seleccionar el nombre clave para los ligandos
 1. Crear el nombre clave de los ligandos
 2. Asignar clave a los ligandos
 3. Configurar archivo .sh con el nombre clave

```
# Instalar mmv para nombrar los archivos
sudo apt install mmv

ls # no dara:
alqueno.pdbqt
```

```
alquenob.pdbqt
alquenoc.pdbqt
# Les asignaremos la clave ligands
# El asterisco indica que todo lo que vaya antes pero con terminacion .pdbqt
lo reconozca
# El '#1' nos permitira guardar el nombre de nuestros archivos despues de la
clave dada
mmv '*.pdbqt' 'ligand_#1.pdbqt'
ls # comprobamos que nuestros archivos tengan la clave
ligand_alqueno.pdbqt
...
```

5. Copiar proteína y archivo de configuración

1. Corroborar que el nombre del archivo de configuración dentro del archivo .sh corresponda con el nombre del archivo .txt de la carpeta

```
# copiar archivos a la carpeta actual
cp /ruta/carpeta/proteina/nombreproteina.pdbqt .
cp /ruta/carpeta/proteina/archivoconfig.txt .

vi run.sh
# Corroboramos que nuestro archivo de configuracion tenga el mismo nombre que
en el script. Modificamos/Salimos del archivo
```

6. Realizar el docking

```
# Corremos el archivo
bash run.sh
```

7. Almacenar resultados

```
# Guardar los resultados en un archivo .txt
grep VINA ligand_*/out.pdbqt > result.txt
vi result.txt # ver resultados
```

3. Abrir mgltools

1. Movernos al directorio de mgltools
2. Ejecutar ./pmv

```
cd /usr/local/MGLTools-1.5.6/bin
sudo ./adt
```

#contraseña:

3. [Manual – AutoDock Vina](#)

convertir ligandos de .mol2 a .pdbqt

```
for mol2file in *.mol2; do
    pdbqtfile="${mol2file%.mol2}.pdbqt"
    obabel "$mol2file" -O "$pdbqtfile" >> conversion_log.txt 2>&1
done
rm *.mol2
```

prep autodocktools

[Molecular Docking Tutorial: AUTODOCK VINA - PART 1 | Beginners to Advanced](#)

Convertir Ligandos

Si conviertes ligandos del .mdb a .mol2

Tendrás problemas con los tipos de enlace. Entonces puedes usar el formato .PDB

1. Obtener el archivo .mdb
2. Abrir MOE y seleccionar la columna, esta guardarla en formato .pdb
 1. Seleccionar la opción de una molécula por archivo
 2. Los archivos guardarlos en una carpeta en específico (ej. STRAT_VINA_10k)
3. Usar obabel para convertir los archivos de .pdb a .pdbqt
4. remover los archivos .pdb

```
for file in *.pdb; do
    obabel "$file" -O "${file%.pdb}.pdbqt"
done
rm *.pdb
```

5. Pegar los archivos de conf, run y la proteína dentro de la carpeta
6. correr el docking

Contar archivos

```
find . -type f -name "*.pdbqt" | wc -l
```