

Prep Docking LeDock P

Input / Output

Input: .smi

Output:

- .sdf generado con openbabel
- .mol2 generado con openbabel
- .txt con el listado con de las moléculas generadas en formato .mol2

Instalación de Paqueterías

HTML

Forma visual de seleccionar archivos

Funciones terminal

1. Molconvert : Instalar de Chemaxon, se necesita licencia
2. Bash: Es el entorno que estamos empleando
3. Obabel: Open babel
 1. Se debe instalar en la terminal

```
sudo apt-get update
sudo apt-get install openbabel
```

#nota Hay problemas de incompatibilidad al emplear únicamente obabel, pues este no registra de la misma forma que molconvert. Es decir no guarda en el primer renglón la información de la molécula. Se necesitan hacer correcciones en cuanto al archivo 'change_name.sh'

```
# copiar archivos entre windows y ubuntu

cp ./source /mnt/c/Documents\ and\ Settings/zonam/Documents/
#(el . es de la ruta actual)
```

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

2. Metodología

Preparación de ligandos

Necesitas tu archivo en igual .mol2

este tiene que ser preprado con MOE para que los ligandos contengan en el archivo sus nombres (IDs),

Emplear modulo de lefrag para separarlos

Verificar que sean todosl os ligandos

Ver si tienen errores de compatibilidad entre windows y linux

eliminar error de compatibilidad

hacer lista de ligandos

```
lefrag -spli PTP1B_DB_CURATEDMOL2.mol2

ls -l | wc -l
ls -l | cat -v

for f in *$'\r'.mol2; do mv "$f" "$(echo $f | tr -d '\r')"; done

ls *.mol2 > ligands.txt
```

Resultados

1. Crear una carpeta para el archivo .dok
2. Separar resultados con ledock para obtener .pdb
3. Transformar a .mol2
 1. Recuerda hacer compatible los mol2

```
ledock -spli ligand4xzhprep_cofactor.dock
ls
```

ligand01.pdb ligand02.pdb etc

1. Calcular RMSD

- 2.