

Minicurso 6: Refinamento de novo de ligantes de alvos biológicos usando o software DOCK6 e preparação de cálculos alquímicos de energia livre relativa

10º Simpósio de Estrutura Eletrônica e Dinâmica Molecular

Guilherme Duarte, Ph. D.

1 Instruções

Atenção: Este minicurso usa o software DOCK6, que é gratuito apenas para usuários acadêmicos (alunos, professores, pesquisadores). É importante que, caso queira usar o software em sua pesquisa pessoal, acesse o site <https://dock.compbio.ucsf.edu>, faça o download e peça a licença. Por ser um software pago para usuários não acadêmicos, deve-se ter muito cuidado para não correr riscos jurídicos.

Neste minicurso, usaremos a versão 6.10 do programa DOCK6, que é instalável em computadores que rodam sistemas operacionais Linux ou MacOSX. É possível usar o software em uma máquina de sistema operacional Windows por meio de ambientes WSL.

Usando o terminal, digite o comando:

```
git clone https://github.com/gduarter/MinicursoSEEDMOL.git
```

Esse comando fará o download do material do curso diretamente para a sua estação de trabalho. Para usarmos os materiais do curso com sucesso, devemos instalar algumas ferramentas conforme as instruções a seguir:

```
sudo apt update
sudo apt install -y make
```

Tendo cumprido essa etapa:

```
make conf-conda
make conda_parameters
```

e siga as instruções impressas na tela. A instalação do DOCK6 pode ter alguns problemas em alguns computadores devido à ausência de alguns pacotes necessários. Caso isso aconteça, dê o comando:

```
make conda_correct
```

para resolver o impasse. É importante ressaltar que MacBooks podem sofrer com incompatibilidades em compiladores GCC, G++ e GFORTRAN por adotarem uma versão antiga do POSIX. Isso é resolvido por meio da instalação de uma nova suite de compiladores GNU usando o *homebrew*:

```
brew install gcc@11
```

e alterando os compiladores indicados no arquivo `config.h` gerado durante a configuração da instalação do DOCK6. Após concluída a instalação do DOCK6, use o comando:

```
make conda_parmed
```

1.1 Fim de curso

Ao final do curso, use:

```
make clean
```

para apagar o software.

1.2 Visualização

Para visualizar estruturas de proteínas e ligantes, recomenda-se o uso do software UCSF Chimera ou UCSF ChimeraX, que podem ser encontrados por meio dos seguintes links:

(i) <https://www.cgl.ucsf.edu/chimera/download.html>

(ii) <https://www.cgl.ucsf.edu/chimerax/download.html>