

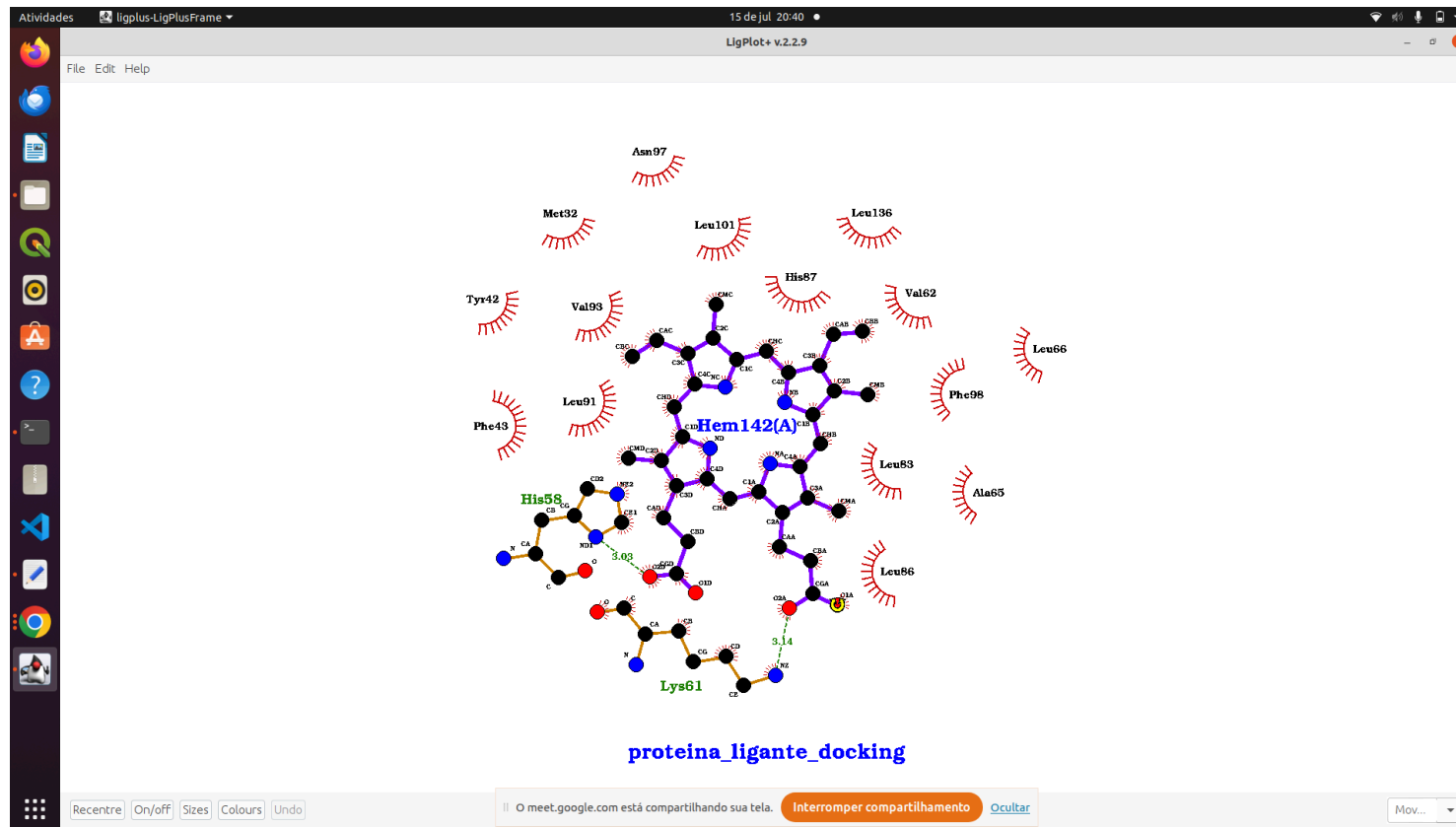
**Table 1. Parameters affinity of the molecular docking Vina.**

**Proteína: hemoglobina humana desoxigenada**

<b>Complex (Protein-ligand)</b>	<b><math>\Delta G_{\text{bind}}</math> (kcal/mol)</b>	<b>Amino acids that interact through hydrogen bonds (distance Angstrom)</b>	<b>Amino acids that make hydrophobic interactions</b>
1a3n_hem	-12.4	<b>His58</b> – distância: 3.03 Å <b>Lys61</b> – distância: 3.14 Å	<b>-Tyr42, Phe43, Val93, Leu101, Asn97, Met32, Leu136, His87, Val62, Leu66, Phe98, Leu83, Leu86, Ala65, Leu91</b>
1a3n_1eqg	-5.2	O aminoácido que interage com o ligante por ligação de hidrogênio é <b>Ser102 (2.92 Å)</b> .	Os aminoácidos que fazem interações hidrofóbicas com o ligante são: <b>Leu101, Leu105, Leu136, Leu66, Leu83, Val62, His87, Ala65, Lys61, Ser133 e Phe98.</b>
1a3n_3c2u	-5.4	<b>Ser138</b> – ligação de hidrogênio com distância 2.78 Å <b>Ser102</b> – ligação de hidrogênio com distância 2.91 Å <b>His58</b> – ligação de hidrogênio com distância 3.14 Å	Os aminoácidos que participam de interações hidrofóbicas com o ligante são: <b>Leu105, Leu129, Leu136, Val62, Val93, Val132, Phe98, Leu101, Asn97, His87, Leu66 e Val29.</b>

E inserir uma imagem do complexo (proteína e o ligante) com menor energia de ligação.

Proteína e o ligante com melhor energia de ligação (-12.4)  
Captura de tela após o ancoramento no LigPlot



Atividades

UCSF ChimeraX 1.10

16 de jul 19:33

ChimeraX

File Edit Select Actions Tools Favorites Presets Help

Home

Molecule Display

Nucleotides

Graphics

Map

Medical Image

Markers

Right Mouse

Open Recent Save

Snapshot Spin movie

Show Hide

Show Hide

Stick Sphere Ball stick

White Black

Simple Soft Full

Inspect

File

Images

Atoms


Cartoons

Styles

Background

Lighting

Selection



Log

UCSF ChimeraX version: 1.10 (2025-06-26)  
© 2016-2025 Regents of the University of California. All rights reserved.  
[How to cite UCSF ChimeraX](#)  
[open](#)  
[/home/oliveiras/Downloads/TRABALHO\\_BIOINFORMATICA/1a3](/home/oliveiras/Downloads/TRABALHO_BIOINFORMATICA/1a3)

Chain information for  
multiplas\_mole\_1a3n\_ligante\_docking.pdb #1

Chain	Description
?	<a href="#">No description available</a>

Computing secondary structure

Models

Name	ID			
multiplas_mole_1a3n_ligante_docking.pdb 1			✓	

Close

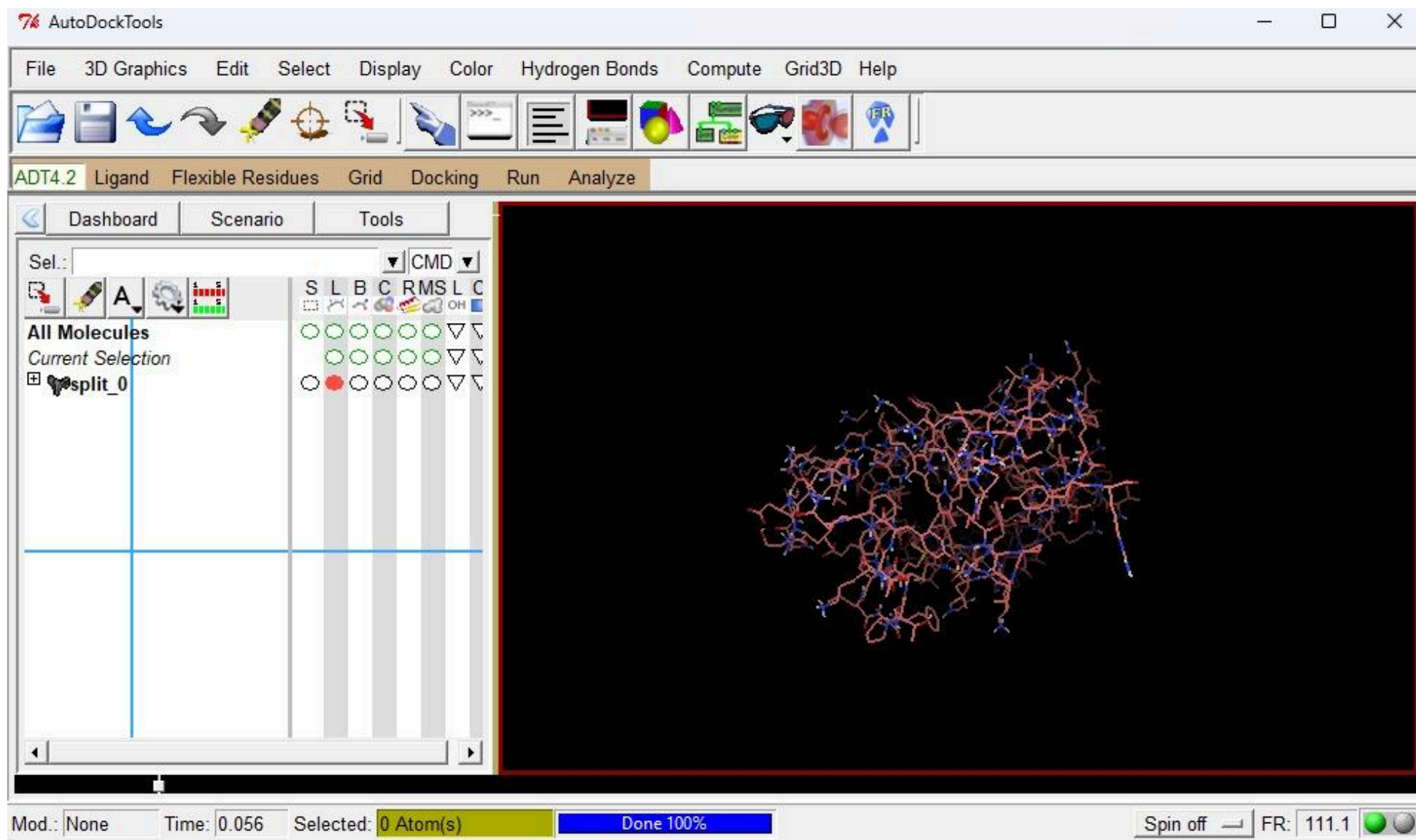
Hide

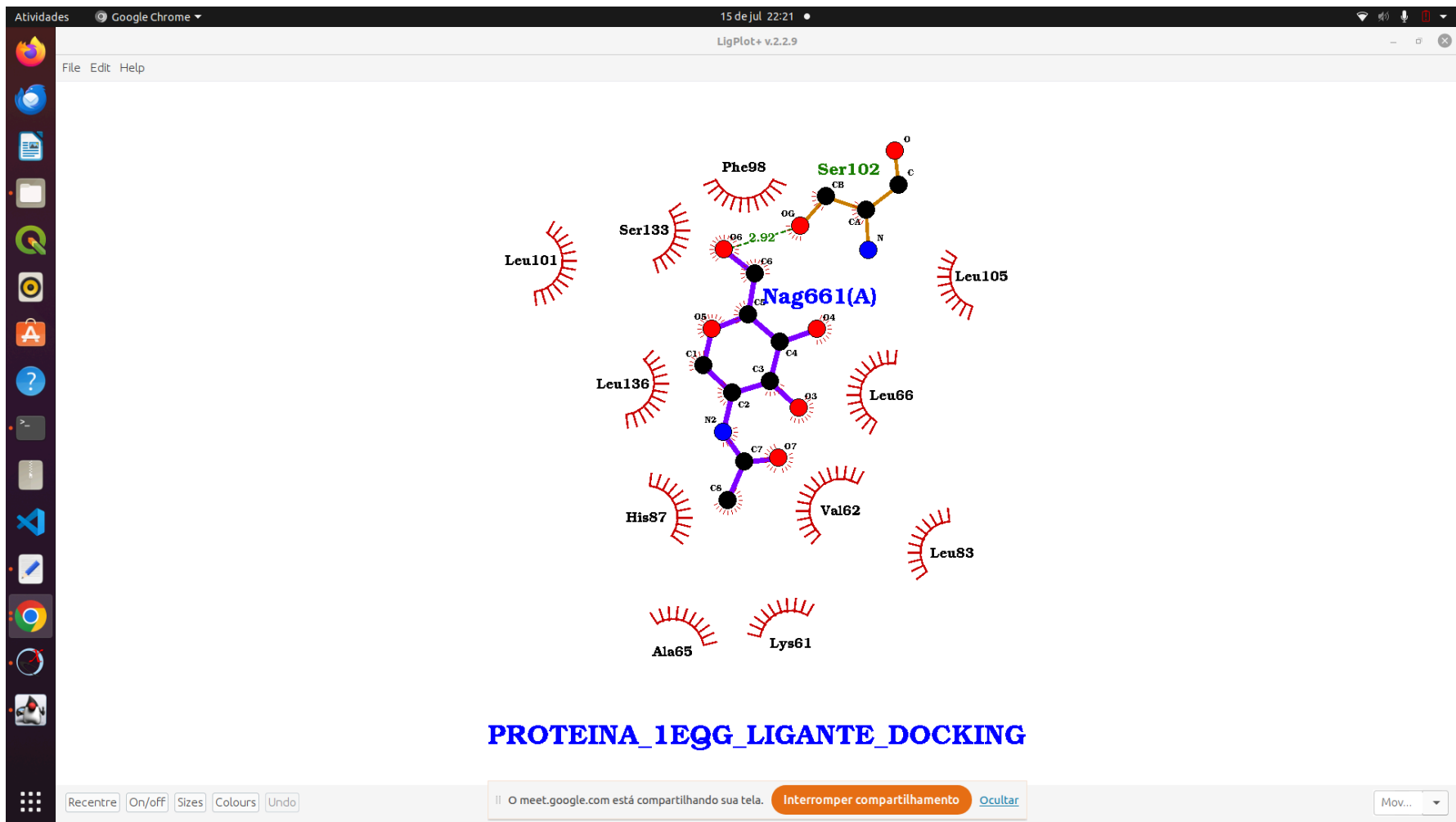
Show

View

Info

Command:





```
Atividades Terminal 15 de jul 20:11
oliveiras@Oliveiras: ~/Downloads/trabalho ricardo

oliveiras@Oliveiras:~/Downloads$ cd ..
oliveiras@Oliveiras:~$ vina.exe --config config.txt
bash: vina.exe: comando não encontrado
oliveiras@Oliveiras:~$ vina --version
AutoDock Vina 1.1.2 (May 11, 2011)
oliveiras@Oliveiras:~$ vina --config config.txt

Error: could not open "config.txt" for reading.
oliveiras@Oliveiras:~$ cd Downloads/
oliveiras@Oliveiras:~/Downloads$ cd trabalho\ ricardo/
oliveiras@Oliveiras:~/Downloads/trabalho ricardo$ vina.exe --config config.txt
bash: vina.exe: comando não encontrado
oliveiras@Oliveiras:~/Downloads/trabalho ricardo$ vina --config config.txt
#####
# If you used AutoDock Vina in your work, please cite:      #
#                                                           #
# O. Trott, A. J. Olson,                                    #
# AutoDock Vina: improving the speed and accuracy of docking #
# with a new scoring function, efficient optimization and    #
# multithreading, Journal of Computational Chemistry 31 (2010) #
# 455-461                                                    #
#                                                           #
# DOI 10.1002/jcc.21334                                     #
#                                                           #
# Please see http://vina.scripps.edu for more information.   #
#####
Detected 8 CPUs
Reading input ... done.
Setting up the scoring function ... done.
Analyzing the binding site ... done.
Using random seed: -1569418907
Performing search ...
0% 10 20 30 40 50 60 70 80 90 100%
|---|---|---|---|---|---|---|---|---|
*****
done.
Refining results ... done.

mode | affinity | dist from best mode
      | (kcal/mol) | rmsd l.b. | rmsd u.b.
-----+-----+-----+-----
1      -12.4      0.000      0.000
2      -11.4      3.332      7.334
3      -10.9      3.321      7.275
4      -10.6      4.008      7.852
5      -10.4      1.324      6.056
6      -10.3      4.151      9.778
7      -10.3      2.353      6.599
8      -10.1      1.403      5.863
9       -9.6      4.084      9.686
10      -9.5      2.187      6.481

Writing output ... done.
oliveiras@Oliveiras:~/Downloads/trabalho ricardo$
```