

Molecular Docking in the Cloud: Introduction to Molecular Docking

PhD. Pablo Ricardo Arantes
PhD. Conrado Pedebos

Porto Alegre, July 14th 2025

Introduction to Molecular Docking

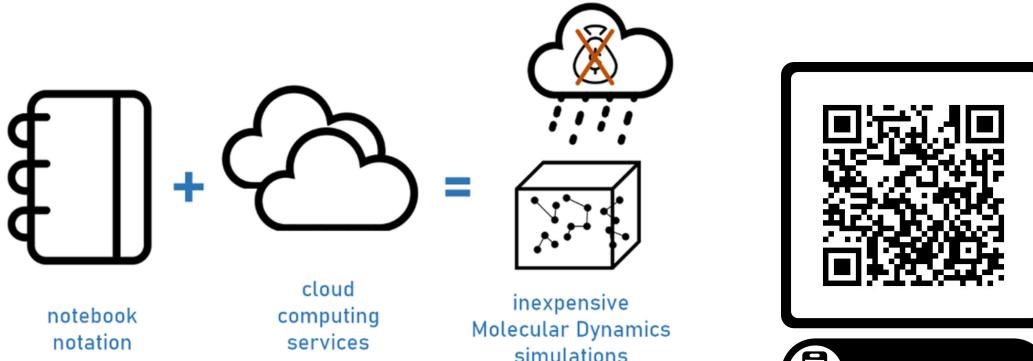
JCIM
JOURNAL OF
CHEMICAL INFORMATION
AND MODELING

pubs.acs.org/jcim Letter

Making it Rain: Cloud-Based Molecular Simulations for Everyone

Pablo R. Arantes,* Marcelo D. Polêto, Conrado Pedebos, and Rodrigo Ligabue-Braun

 Cite This: *J. Chem. Inf. Model.* 2021, 61, 4852–4856 



 SCAN ME

<https://pablo-arantes.github.io/making-it-rain>

Introduction to Molecular Docking

Summary of Course Flow:

Day 1: Introduction to Molecular Docking

Day 2: Docking with GNINA: AI-Powered Docking

Day 3: Uni-Dock: High-Performance Docking with GPU Acceleration

Day 4: Virtual Screening: Filters, ADME, and Druglikeness

Day 5: Post-Docking Analysis and Pose Stability

Slides + Notebooks



SCAN ME

Introduction to Molecular Docking

Parte Prática - Docking Simples

- 1) Preparação do receptor;
- 2) Preparação do ligante;
- 3) Construção do Grid-box no receptor;
- 4) Docking com função de score do Vina;
- 5) Seleção da melhor pose.

Notebook



SCAN ME

Introduction to Molecular Docking

How Google Colab works?

Google colab

[Blog](#) [Release Notes](#)

[Notebooks](#)

[Resources](#)

[Open Colab](#)

[New Notebook](#)

[Sign Up](#)



Google Colaboratory

Colab is a hosted Jupyter Notebook service that requires no setup to use and provides free access to computing resources, including GPUs and TPUs. Colab is especially well suited to machine learning, data science, and education.

[Open Colab](#)

[New Notebook](#)



Introduction to Molecular Docking

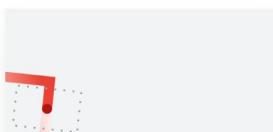
How Google Colab works?

Science



AlphaFold

This Colab notebook allows you to easily predict the structure of a protein using a slightly simplified version of AlphaFold v2.3.2.



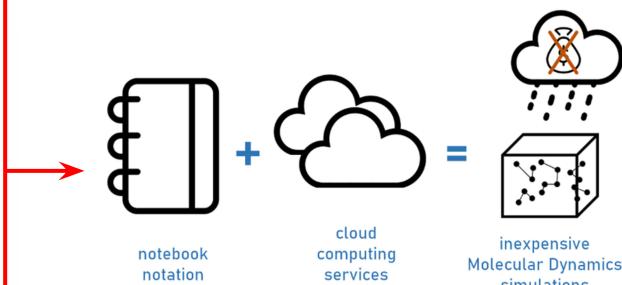
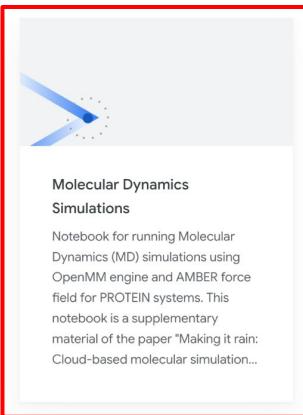
AlphaTensor

This Colab shows how to load the provided .npz file with rank- 49 factorizations of $\mathcal{T}4$ in standard arithmetic, and how to compute the invariants \mathcal{R} and \mathcal{K} in order to demonstrate that these factorizations are mutually...



Google Earth API

This notebook demonstrates how to setup the Earth Engine Python API in Colab and provides several examples of how to print and visualize Earth Engine processed data.

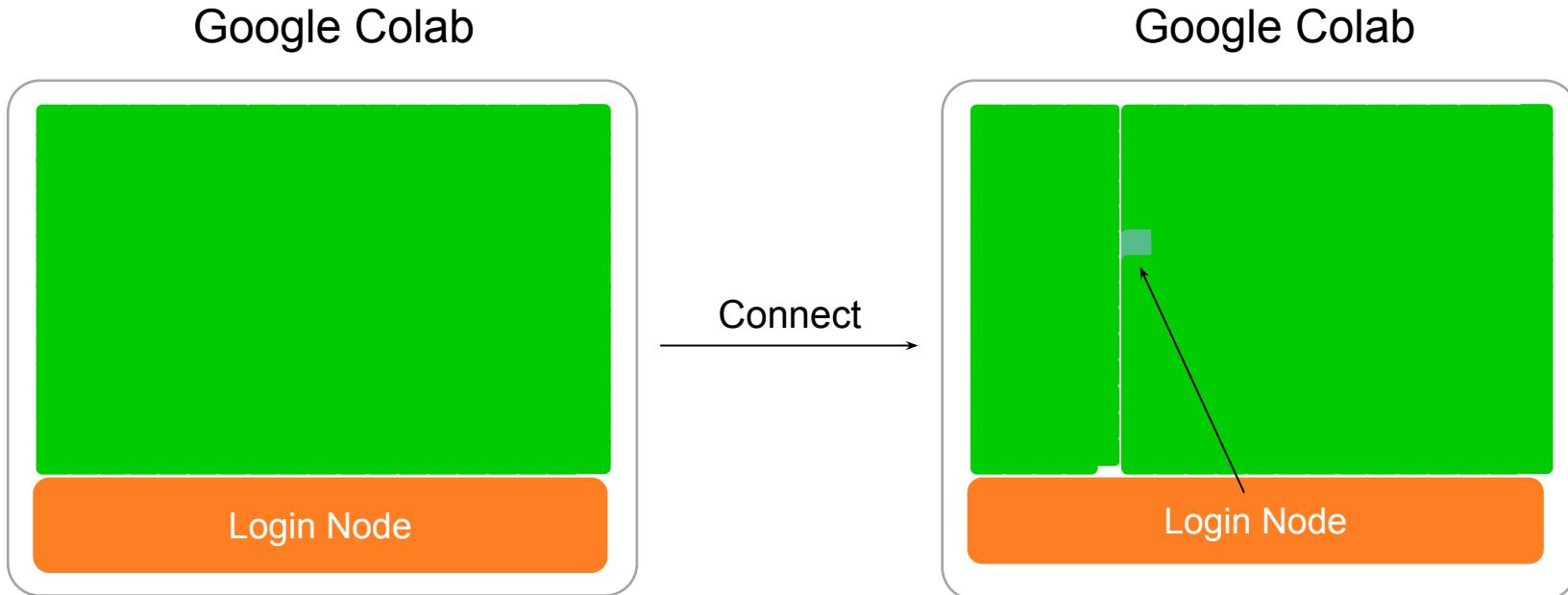


<https://pablo-arantes.github.io/making-it-rain>

<https://colab.google/notebooks/>

Introduction to Molecular Docking

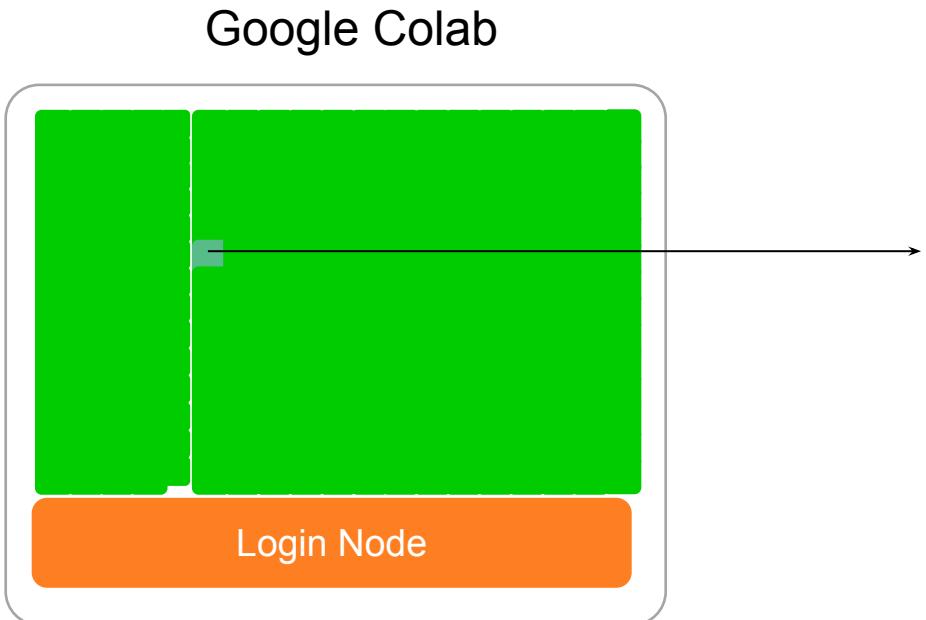
How Google Colab works?



■ = Virtual Machine

Introduction to Molecular Docking

How Google Colab works?

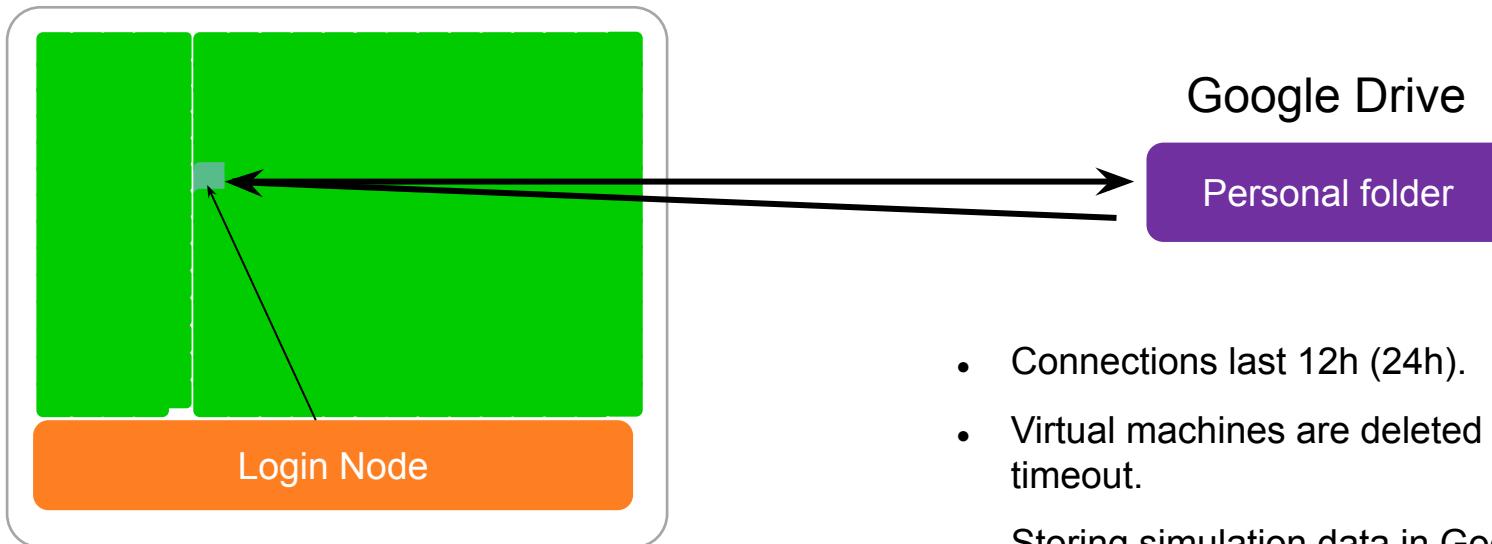


- Colab Free!
 - Colab Pro = USD 9.90 / month
 - Colab Pro+ = USD 49.90 / month
-
- All GPU and RAM memory.
 - Free Colab: **Nvidia T4**
 - Pro Colab: **Nvidia T4**, **Nvidia K80**, **Nvidia P100** and **Nvidia V100**

Introduction to Molecular Docking

How Google Colab works?

Google Colab



- Connections last 12h (24h).
- Virtual machines are deleted after timeout.
- Storing simulation data in Google Drive is a workaround but requires **storage space!**

Introduction to Molecular Docking

What are Jupyter notebooks?

- Web-based interactive development environment for code and data.
- They are usually written as actual protocol notebooks that can be ran multiple times to yield results.



Introduction to Molecular Docking

Busca tentar **predizer a posição e orientação** de moléculas com seus receptores. A predição da interação é baseada nas possíveis posições, orientações e conformações que uma molécula pode assumir dentro do sítio ativo, ou cavidade de ligação, de um determinado alvo.

- Atracamento;
- *Docking*;
- Ancoramento;

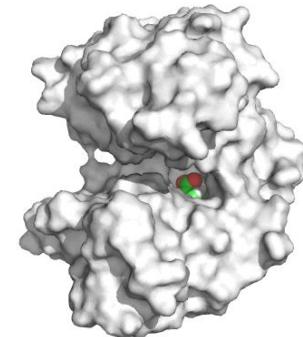
Algoritmo de Busca



Predizer as diversas **possibilidades de conformações** para um ligante.

Função de Avaliação

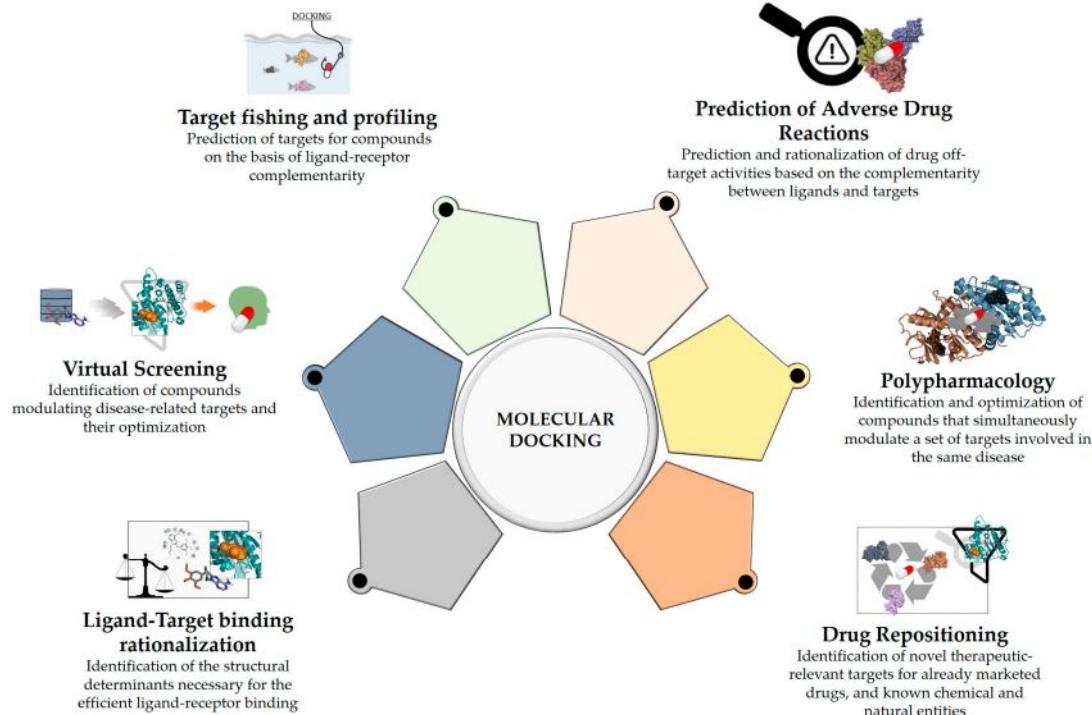
Quantifica a **qualidade** das poses predita.



Introduction to Molecular Docking

- O *Docking Molecular* (ou atracamento molecular) define-se como uma técnica computacional que visa auxiliar na compreensão dos mecanismos de interação entre macromoléculas como proteínas ou delas com pequenas moléculas, os ligantes.

Introduction to Molecular Docking



Introduction to Molecular Docking

Artificial intelligence (AI)
and statistical methods

Pre-docking screening

- Selection of protein conformations for virtual screening
- Improvement of scoring functions

Post-docking screening

- Pose rescore

Ligand-based approaches

Pre-docking screening

- Selection of protein conformations for virtual screening

Post-docking screening

- Pose selection
- Pose rescore



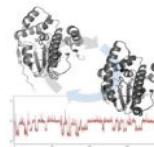
Molecular
Docking



Binding Free
Energy methods

Post-docking screening

- Pose rescore



Molecular Dynamics (MD)

Pre-docking screening

- Identification of representative conformations for virtual screening

Post-docking screening

- Pose refinement
- Ligand-target complex stability assessment

Introduction to Molecular Docking

1º modelo proposto para explicar reações catalisadas por enzima

- Hermann Emil Fischer 1894;
- Especificidade enzimática (ação enzimática);
- Complementaridade geométrica e físico-química;
- Formato correto para servir;
- Considera a estrutura e a conformação como rígidas;

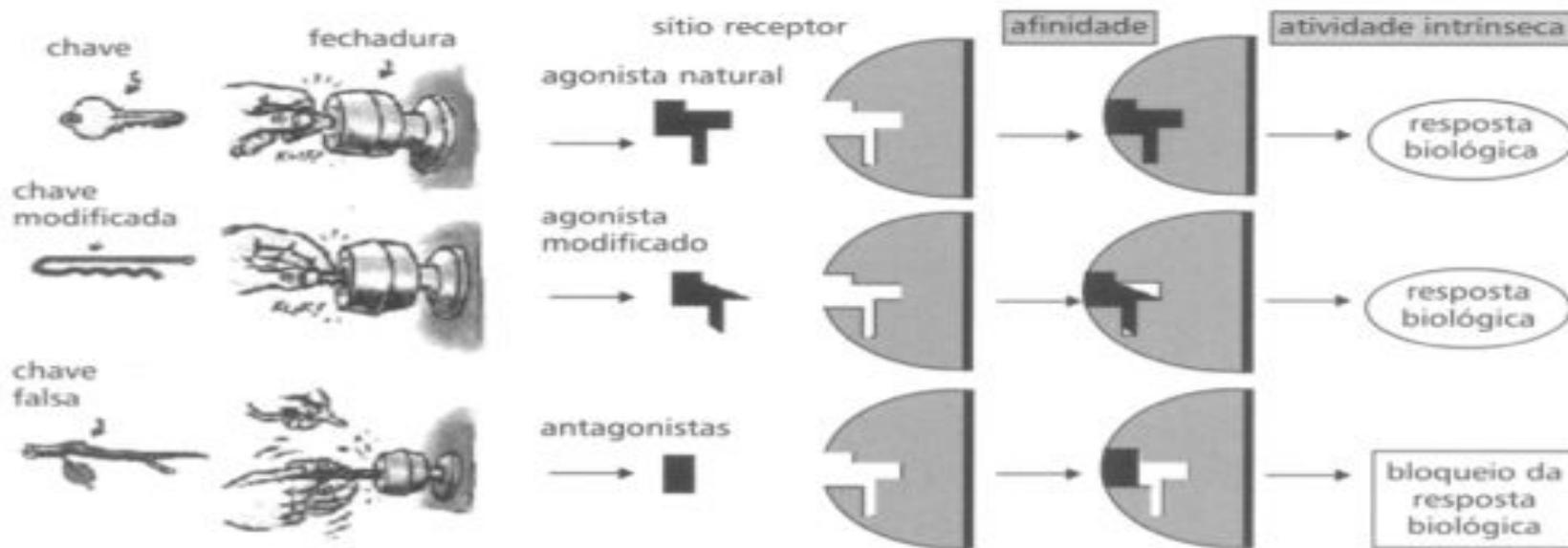


Emil Fischer – Nobel Lecture.
NobelPrize.org. Nobel Prize Outreach AB 2022. Sun. 2 Jan 2022.

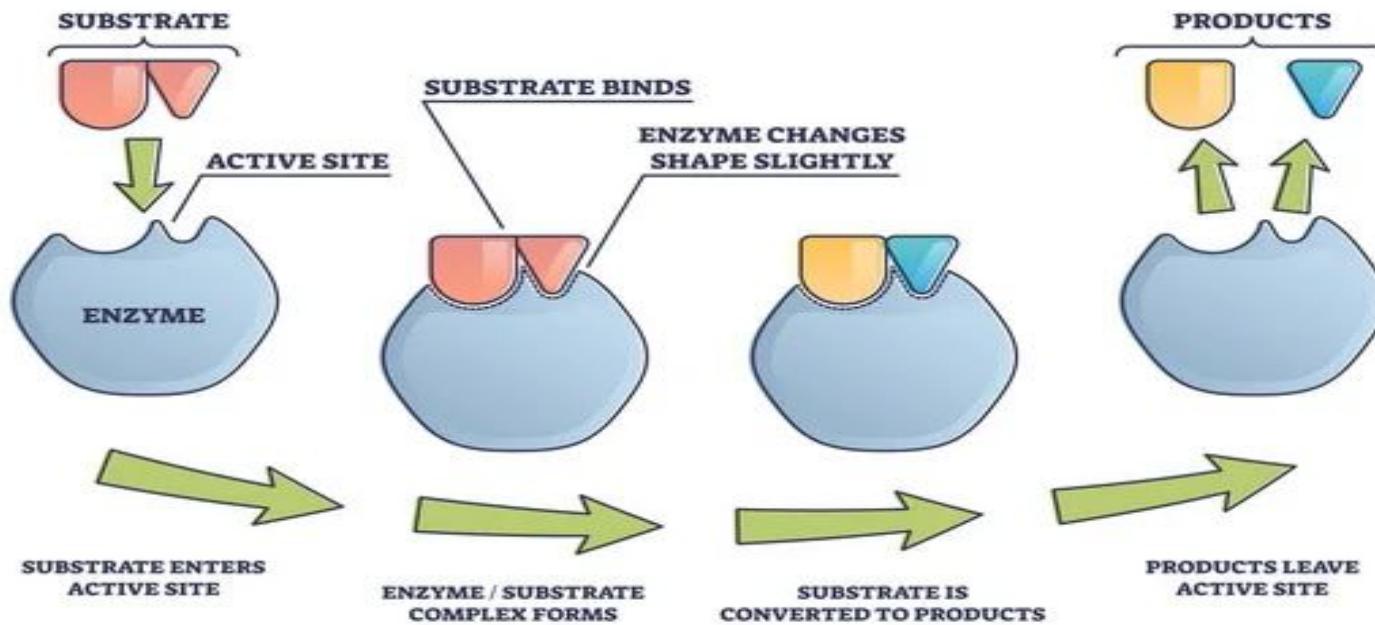
<https://www.nobelprize.org/prizes/chemistry/1902/fischer/lecture/>

1902 - Nobel Prize in Chemistry for his work on sugar and purine synthesis.

Introduction to Molecular Docking

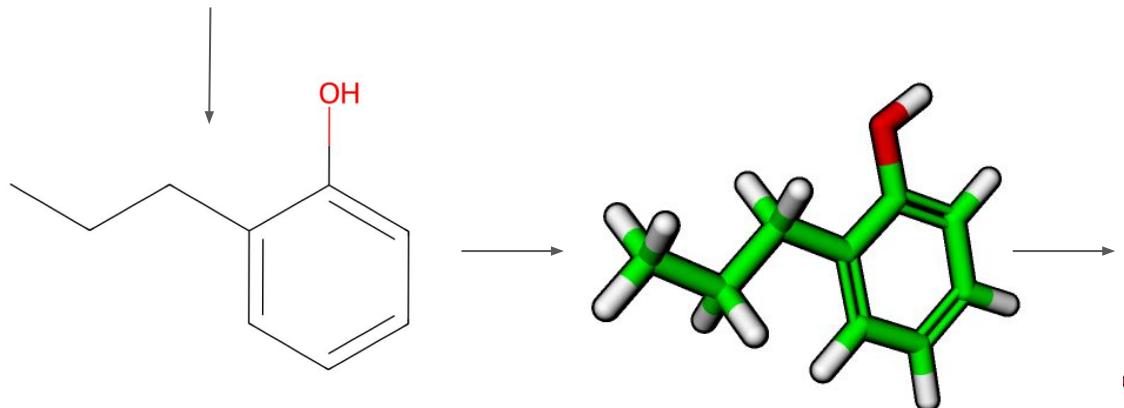


Introduction to Molecular Docking

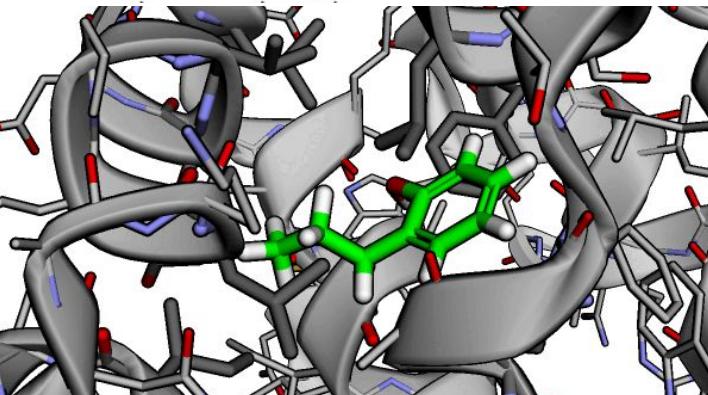


Introduction to Molecular Docking

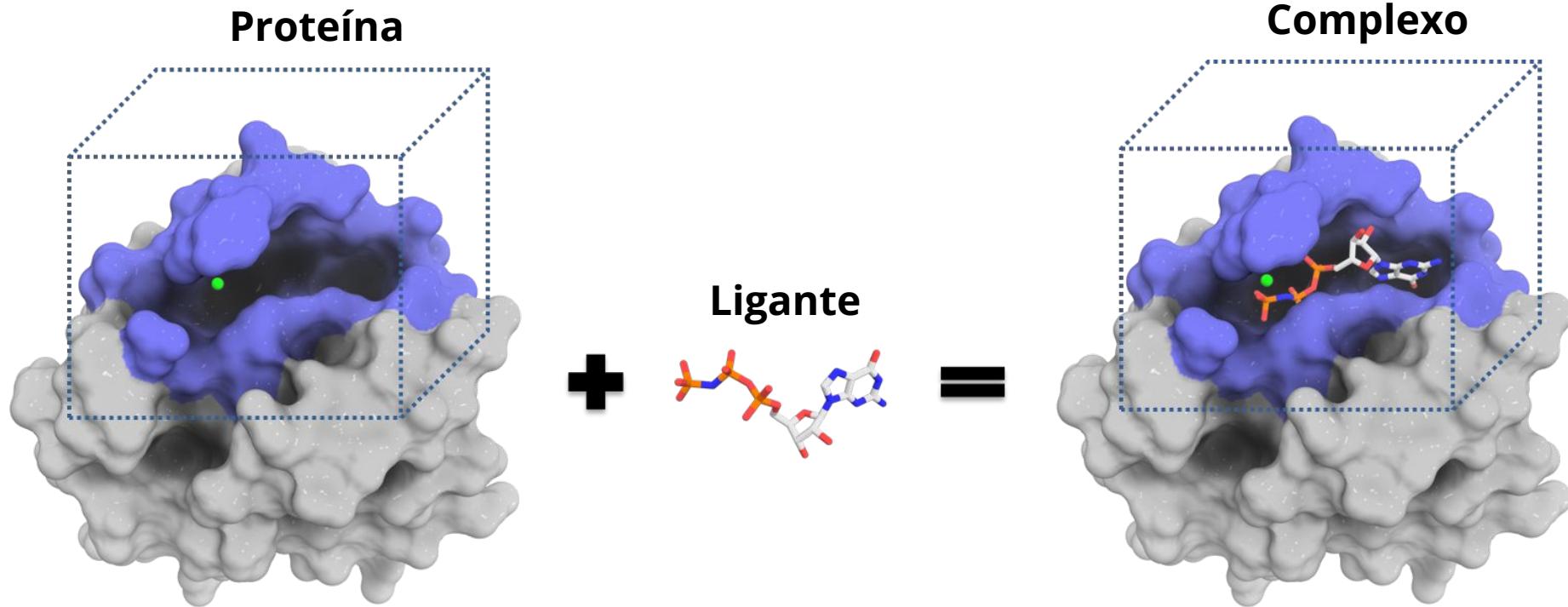
Smiles: CCCC1=CC=CC=C1O



mode	affinity (kcal/mol)	dist from best mode rmsd l.b.	rmsd u.b.
1	-6.814	0	0
2	-6.636	1.568	2.176
3	-5.583	1.249	1.661
4	-5.47	1.383	4.291
5	-5.241	1.603	2.251
6	-5.147	0.9939	1.095
7	-5.074	1.583	3.932
8	-4.991	1.507	4.28
9	-4.618	1.725	4.057
10	-3.997	1.438	2.255



Introduction to Molecular Docking



Introduction to Molecular Docking

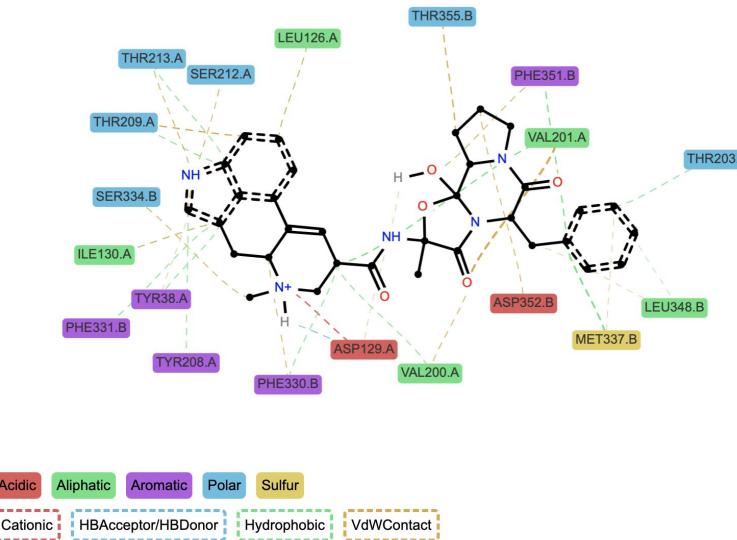
A alta afinidade entre um ligante e uma proteína é o resultado de uma combinação de fatores-chave:

- Encaixe Perfeito (Complementaridade Estérica):
 - As formas do ligante e da proteína se correspondem.
- Atração Química (Complementaridade Físico-Química):
 - Superfícies com propriedades opostas/compatíveis se atraem.
- Estabilidade Conformacional:
 - O ligante adota uma forma estável e de baixa energia ao se ligar.
- Ausência de Repulsão:
 - Minimização de choques atômicos e repulsão de cargas iguais.

Introduction to Molecular Docking

Principais Interações Ligante-Proteína:

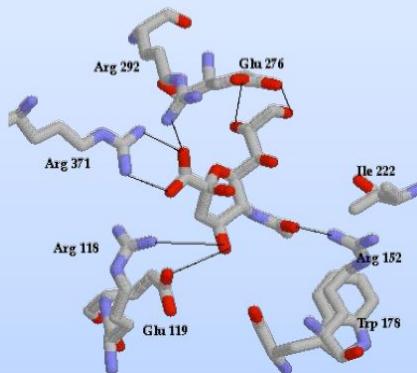
- I. *Ligações de hidrogênio;*
- II. *Interações de van der Waals;*
- III. *Interações iônicas;*
- IV. *Interações hidrofóbicas;*
- V. *Interações do tipo cátion-π;*
- VI. *Interações envolvendo anéis aromáticos do tipo π-π e empilhamento-T;*
- VII. *Coordenação com íons metálicos.*



Introduction to Molecular Docking

Hydrogen-Bonds

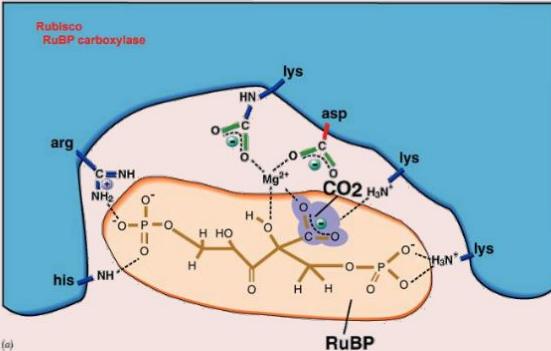
Electrostatic attractions between two dipoles and are often referred to as dipole–dipole interactions.



Contribution for ΔG_{bind} in solution:
1-2 kcal/mol (\approx 5 kcal/mol in water)

Ionic Interactions

Electrostatic attractions between oppositely charged atoms



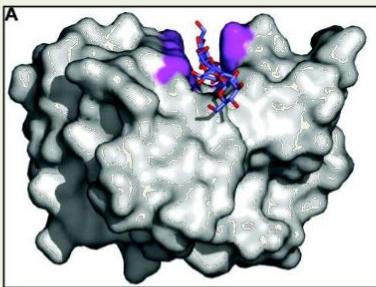
Ionic interactions present in RuBisCO – an enzyme involved in the Calvin cycle, that catalyzes the first major step of carbon fixation, a process by which the atoms of atmospheric carbon dioxide are made available to organisms in the form of energy-rich molecules such as glucose

Contribution for ΔG_{bind} in solution:
1-5 kcal/mol

Introduction to Molecular Docking

Van der Waals

Van der Waals (VDW) or London dispersion forces are weak electrostatic attractive forces between atoms or non-polar molecules caused by the attraction between temporary and induced dipoles produced by the time-dependent fluctuations of the electron density.

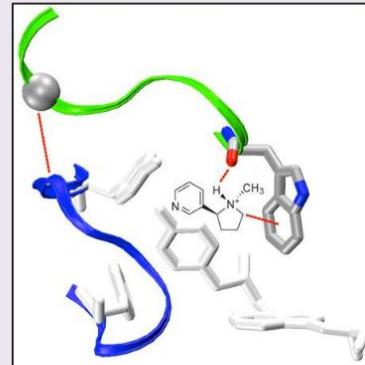


Carbohydrates binding to CBMs (carbohydrate binding modules) are largely driven by van der Waals interactions.

Contribution for ΔG_{bind} in solution \approx
0.5 - 1 kcal/mol per heavy atom pair

Cation- π and Hb- π

Cation- π and Hydrogen bond- π interactions, are noncovalent molecular interactions between the face of an electron-rich π system (e.g. benzene, ethylene) and an adjacent cation (e.g. Li⁺, Na⁺) or a hydrogen bond donor (e.g. OH).



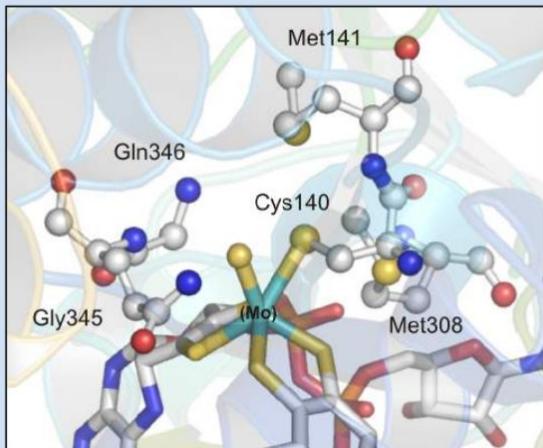
Dougherty found that nicotine makes a strong hydrogen bond in the brain's acetylcholine receptors. This same hydrogen bond, in the receptors in muscle cells, is weak. The cause of this difference in binding potency is a single point mutation that occurs in the receptor near the key tryptophan amino acid that makes the cation- π interaction (lysine vs glycine). Nature 458, 534-537.

Contribution for ΔG_{bind} in solution \approx
1-2 kcal/mol

Introduction to Molecular Docking

Metal chelation

These types of interactions are found when metal ions interact with small molecules or proteins.

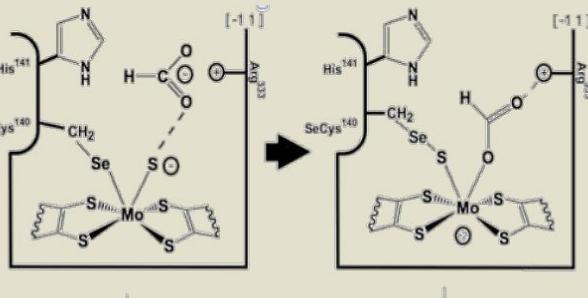


Contribution for ΔG_{bind} in solution \approx
3-5 kcal/mol

Covalent interactions

Covalent interactions occur when two ligand and receptor react and form chemical bonds.

The sulfur Shift

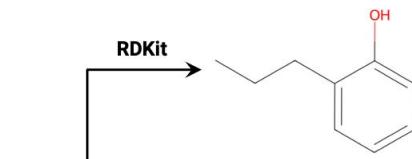


Contribution for ΔG_{bind} in solution \approx
30-200 kcal/mol

Introduction to Molecular Docking

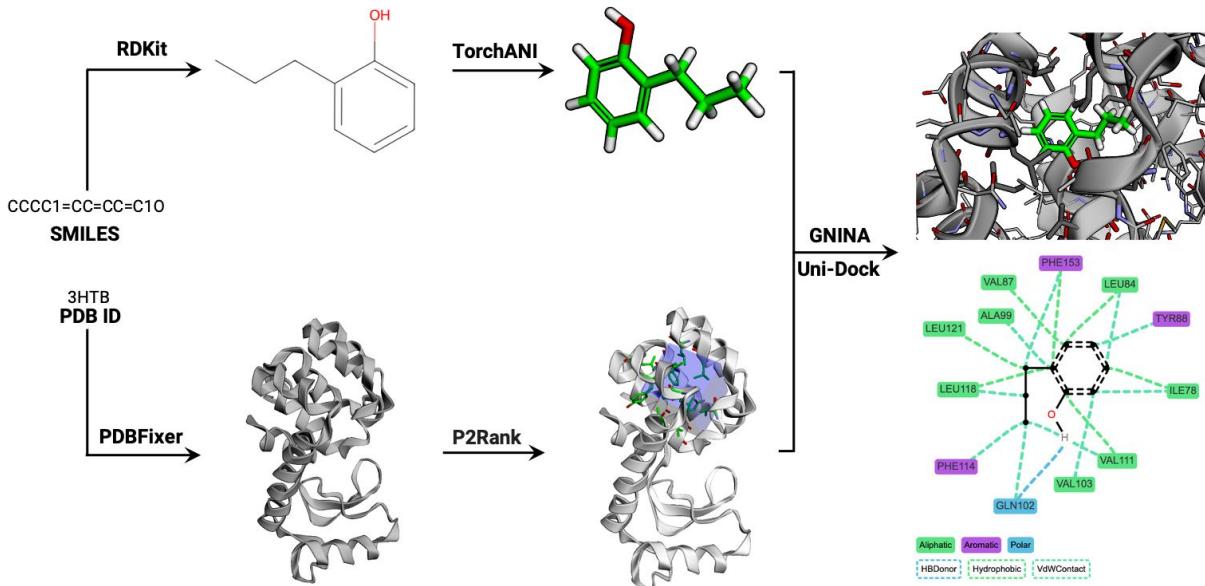
Etapas do Docking Molecular:

I. Preparação do sistema



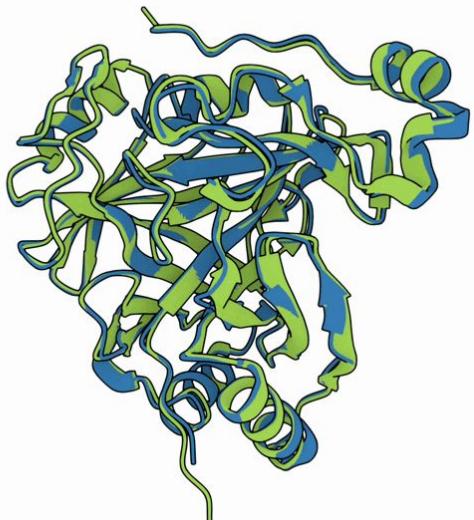
II. Métodos de busca

III. Funções de avaliação



Introduction to Molecular Docking

Obtenção das coordenadas das estruturas tridimensionais das moléculas.



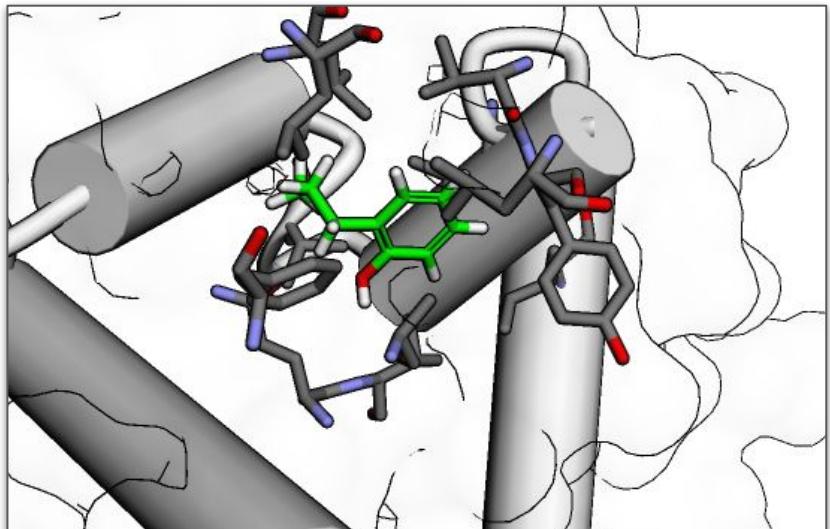
3D-structures:

<https://www.rcsb.org/>

- Cryo-electron microscopy
- X-ray crystallography
- Nuclear magnetic resonance spectroscopy (NMR)
- AlphaFold2

Introduction to Molecular Docking

Sítio de ligação



- Localização;
- Características físico químicas e estruturais;
- Informações sobre a reação enzimática envolvida;
- Estabelecer o estado de protonação correto dos resíduos.

É muito comum que resíduos como **cisteína, glutamato, aspartato e histidina** tenham estados de protonação não usuais, influenciados e estabilizados pelo ambiente eletrostático do sítio ativo.

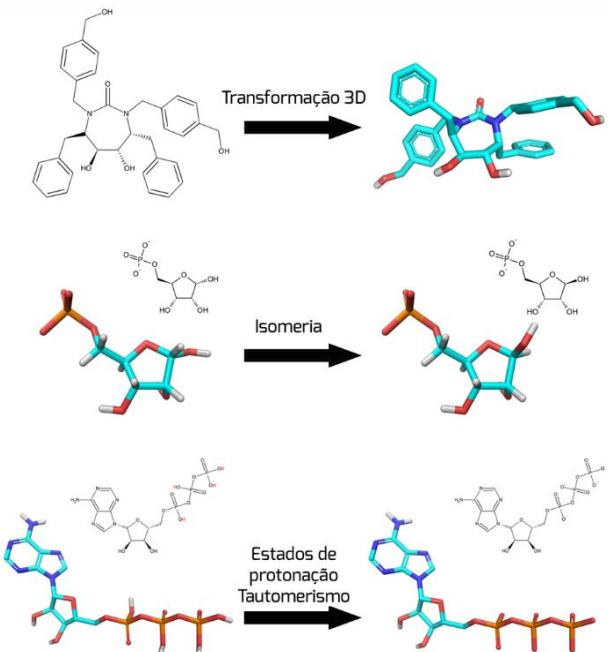
Introduction to Molecular Docking

1- Preparação do sistema

A **correta preparação** das estruturas 3D do ligante e da proteína, juntamente com a correta determinação das moléculas de água estruturais, são etapas **cruciais** para obter **sucesso** na utilização das metodologias de atracamento receptor-ligante.

Introduction to Molecular Docking

1- Preparação do sistema



Com relação ao ligante, a etapa de preparação envolve diversos cuidados, tais como a determinação do seu estado de protonação, estado tautomérico, forma enantiomérica ativa biologicamente, a identificação das suas ligações químicas flexíveis e, a partir destas, a geração de múltiplas conformações.

Introduction to Molecular Docking

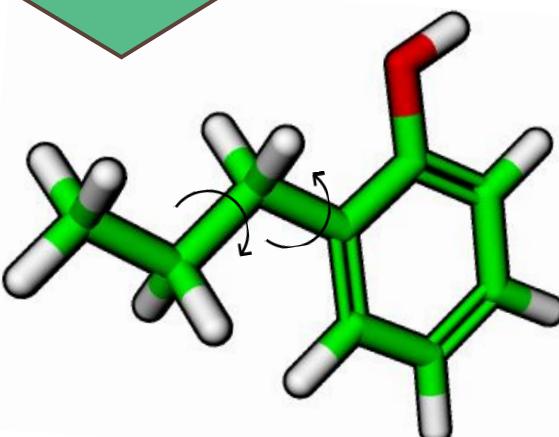
2 - Métodos de busca

Exploração das diferentes orientações e conformações possíveis para um ligante.



solução ótima, ou seja,
o mínimo global de energia

Translação e rotação (graus de liberdade translacionais e rotacionais), ângulos diedrais rotacionáveis (conformacionais)



Graus de liberdade

Introduction to Molecular Docking

2 - Métodos de busca

- i) a **proteína** é considerada **rígida**, e apenas os graus de liberdade **translacionais e rotacionais do ligante** são considerados, ou seja, o **ligante** é fixado em uma **conformação rígida**;
- ii) a **proteína** é considerada **rígida**, mas **todos os graus de liberdade do ligante** (translacionais, rotacionais e conformacionais) são levados em conta;
- iii) a **proteína** é considerada **totalmente ou parcialmente flexível**, e **todos os graus de liberdade do ligante** também são considerados.

Alguns programas utilizam em conjunto algumas destas diferentes abordagens.

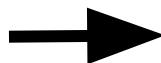
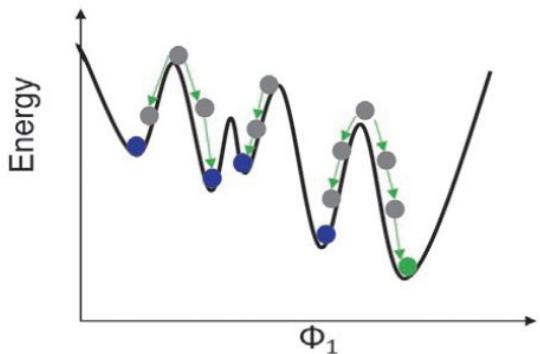
Introduction to Molecular Docking

2 - Métodos de busca

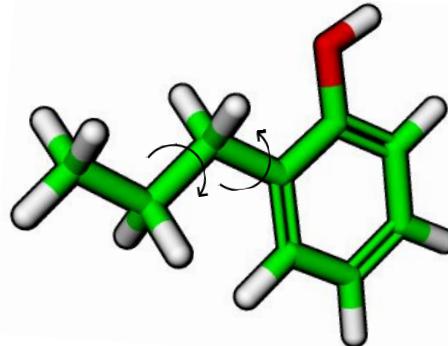
Métodos de Busca Sistemática



Estabelece um conjunto de valores para cada grau de liberdade.



O objetivo é explorar de forma combinatória todos os graus de liberdade da molécula durante a busca.



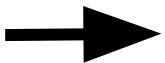
Introduction to Molecular Docking

2 - Métodos de busca

Métodos de Busca Estocástica



Movimentos aleatórios associados aos graus de liberdade.

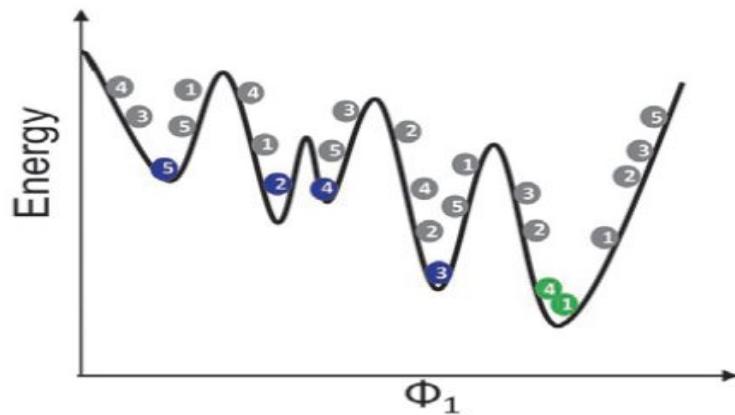


A maioria dos métodos desta classe não possui garantia de convergência.

Introduction to Molecular Docking

2 - Métodos de busca

Nos métodos de busca estocástica o processo de otimização envolve **movimentos aleatórios** associados aos graus de liberdade.



Este fato implica na possibilidade de se obter diferentes resultados como saída para um mesmo estado inicial de entrada.

(Monte Carlo, *Simulated Annealing* e **Algoritmos Evolutivos**)

Introduction to Molecular Docking

3 - Funções de avaliação

As funções de avaliação são combinadas aos métodos de busca para avaliar a **qualidade** das conformações de forma a **ordená-las** de acordo com a sua **afinidade** pelo receptor.



Capaz de **distinguir** o modo de ligação experimental dos outros encontrados pelo método de busca (previsão do modo de ligação).



Capaz de **ordenar** corretamente uma lista de ligantes com relação às suas afinidades pela macromolécula receptora (triagem virtual).



Prever as respectivas energias livres de ligação (predição de afinidade).

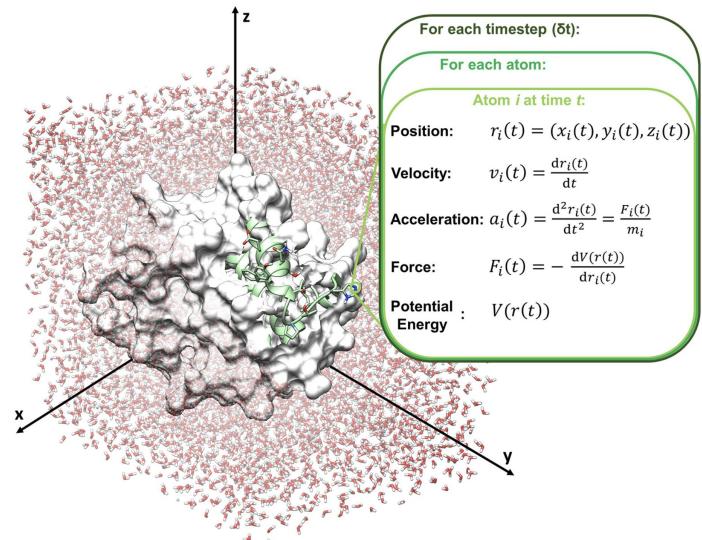
Desempenho

Introduction to Molecular Docking

3 - Funções de avaliação

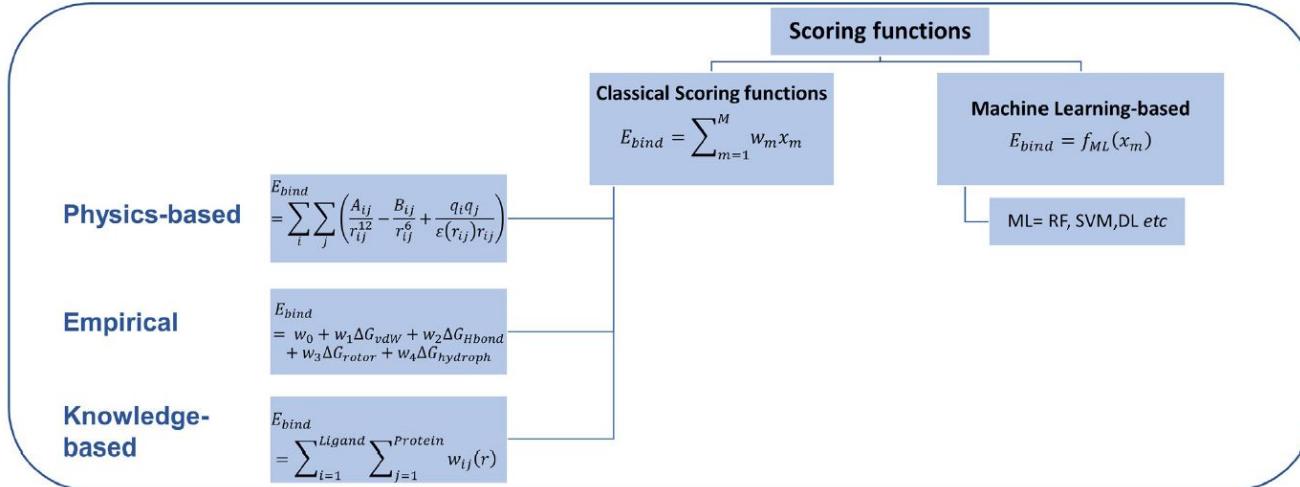
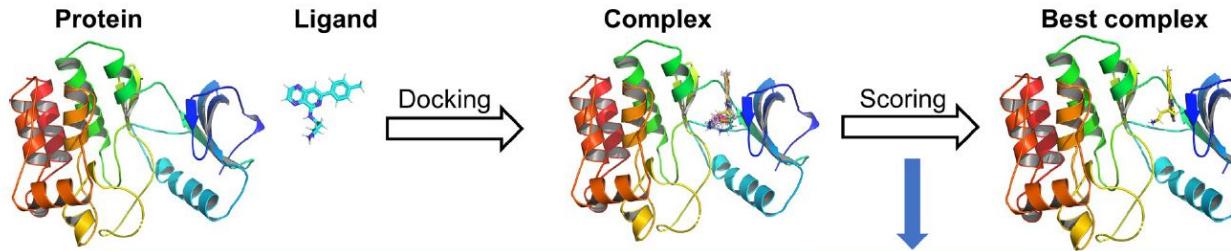
As funções de avaliação mais utilizadas no atracamento molecular receptor-ligante podem ser classificadas em três tipos:

- **Baseadas em campo de força**
- **Empíricas**
- **Baseadas em conhecimento**



Introduction to Molecular Docking

3 - Funções de avaliação



Introduction to Molecular Docking

3 - Funções de avaliação

- **Baseadas em campo de força**

Soma de termos advindos de algum **campo de força molecular clássico**, cuja parametrização pode ser feita utilizando dados experimentais ou provenientes de cálculos quânticos (ou de ambos).

- **Empíricas**

Desenvolvidas utilizando complexos receptor-ligante com **estruturas tridimensionais e afinidades conhecidas**.

Termos são ajustados de forma a reproduzir os dados experimentais de afinidade de ligação com a maior acurácia possível.

- **Baseadas em conhecimento**

Estas funções são construídas a partir de **análises estatísticas entre os pares de átomos dos complexos** receptor-ligante resolvidos experimentalmente.

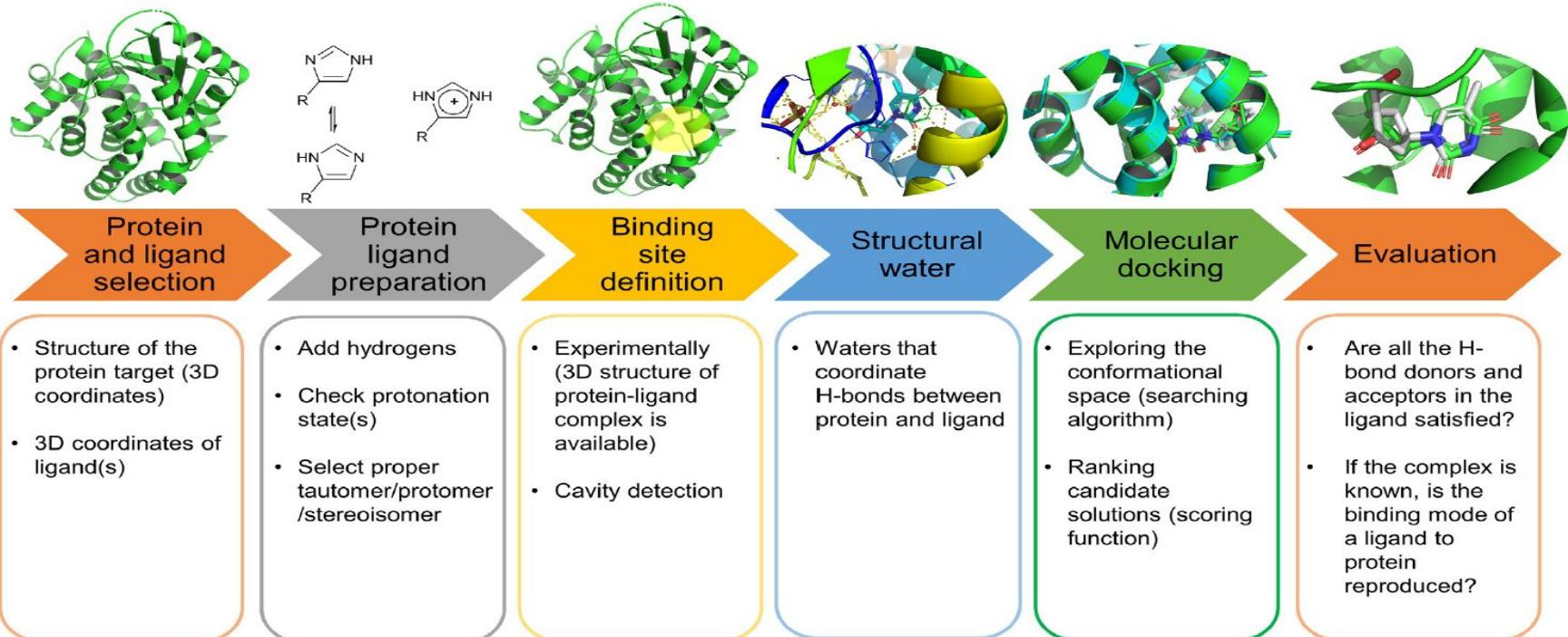
Termos derivados a partir das **frequências** observadas de interações específicas pré-definidas entre os pares de átomos de cada complexo.

Introduction to Molecular Docking

3 - Funções de avaliação

- Não existe uma função de avaliação universal;
- Utilizar a função de avaliação que **mais se adequa** ao problema a ser pesquisado;
- Avaliar a necessidade de utilizar **mais de uma função** de avaliação e comparar (*virtual screening*).

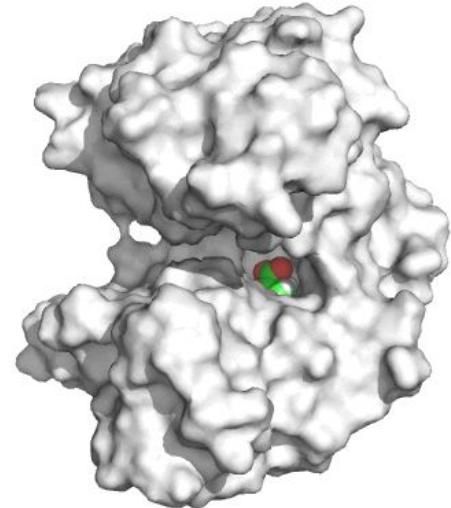
Introduction to Molecular Docking



Introduction to Molecular Docking

Desafios - Identificação de Sítios de Ligação

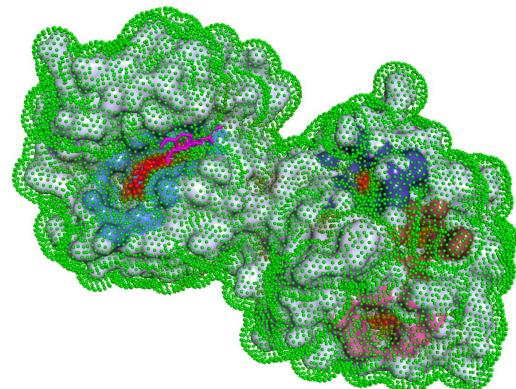
- Quando o sítio de ligação exato de um ligante é desconhecido, a identificação desses sítios a partir da estrutura da proteína é uma etapa crucial.
- Nessas situações, uma abordagem comum seria empregar métodos de busca ampla, como o "blind docking" (encaixe cego), que tenta acoplar um ligante em toda a superfície de uma proteína. No entanto, esta abordagem é computacionalmente custosa e pode ter confiabilidade baixa devido à vasta área de busca.
- Uma alternativa é a utilização de preditores de sítios de ligação de ligantes. Essas ferramentas são projetadas para identificar potenciais locais de ligação na estrutura da proteína. Ex: P2Rank, Fpocket, SiteHound, MetaPocket 2.0 e DeepSite.



Introduction to Molecular Docking

Desafios - Identificação de Sítios de Ligação

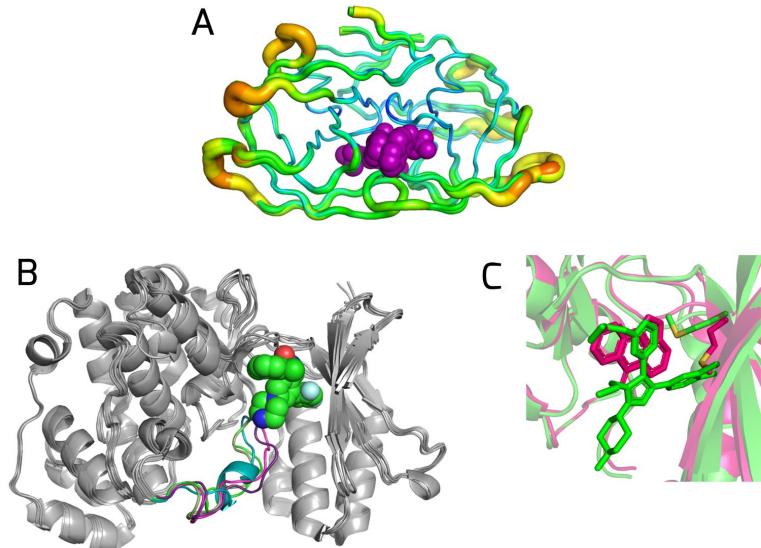
- **P2Rank: Um preditor Avançado de Sítios de Ligação**
 - P2Rank é um software de código aberto, que utiliza aprendizado de máquina para prever sítios de ligação de ligantes.
 - Velocidade e Eficiência: É um dos métodos mais rápidos, necessitando de menos de 1 segundo para predição em uma única proteína.
 - Precisão Superior: P2Rank supera várias ferramentas existentes como Fpocket, SiteHound, MetaPocket 2.0 e DeepSite em benchmarks de desempenho.
 - Facilidade de Uso e Automação: Funciona "out of the box", sem exigir pré-processamento manual, e pode processar estruturas de cadeia única ou múltipla com um único comando.



Introduction to Molecular Docking

Desafios - Flexibilidade da Proteína

Grande número de graus de liberdade dos movimentos do esqueleto peptídico e das cadeias laterais dos resíduos de aminoácidos da proteína.



movimentos de grande escala
(associados a movimentos de domínios da proteína)

movimentos de média escala
(como o rearranjo de alças ou rep
osicionamento de hélices)

movimentos locais
(como o movimento de cadeias later
ais de resíduos de aminoácidos locali
zados no sítio de ligação)

Introduction to Molecular Docking

Desafios - Flexibilidade da Proteína

Três questões importantes que se colocam a respeito destas abordagens e que diferenciam os diversos métodos descritos na literatura:

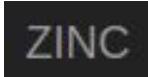
- I. como **utilizar** as diversas conformações da proteína;
 - A. cada conformação da proteína como rígida;
 - B. atracamento molecular para cada conformação;
- II. como **gerar e selecionar** as conformações da proteína;
 - A. Simulações de DM, modos normais, deep learning approaches (BioEmu, AF2).
 - B. Capacidade de amostragem do espaço de configurações do receptor;
- III. como **ordenar** os compostos considerando os atracamentos dos ligantes nas diversas conformações da proteína.
 - A. Média das energias dos ligantes com relação às múltiplas conformações da proteína.
 - B. Considerar a melhor/menor energia obtida por um ligante ao interagir com determinada conformação.

Introduction to Molecular Docking

Virtual Screening

- Complementar os resultados obtidos pela triagem experimental (*high-throughput screening*, em inglês);
- Baseadas na estrutura do receptor (structure-based) ou na estrutura do ligante (ligand-based);
- Moléculas candidatas a novos fármacos necessitam de metodologias mais rápidas, eficazes e de baixo custo.

Bancos de Estruturas de Compostos



Introduction to Molecular Docking

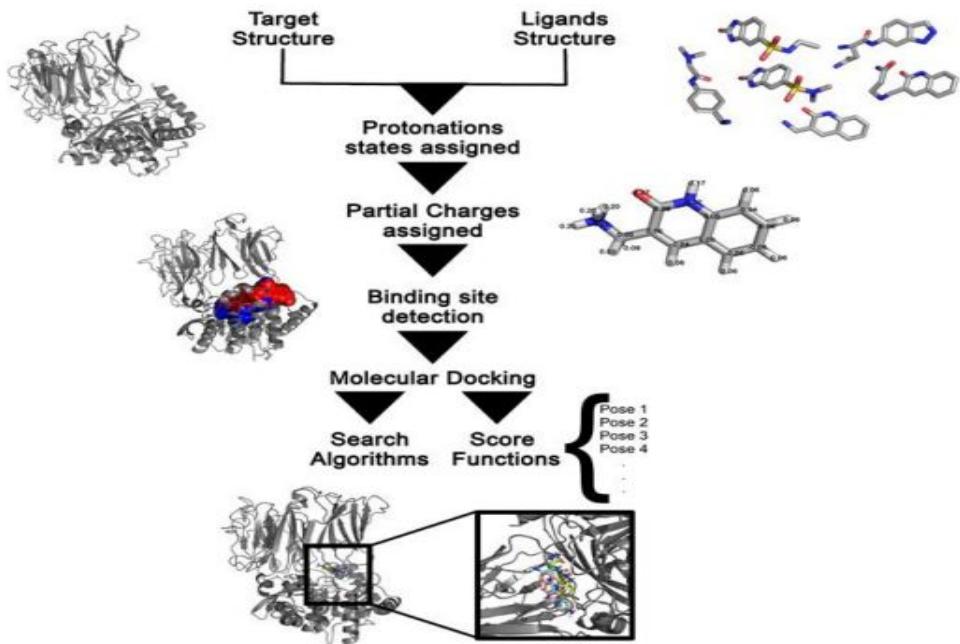
Virtual Screening

Consiste em analisar computacionalmente uma **grande quantidade de ligantes** com o objetivo de selecionar, de acordo com algum critério pré definido, compostos provavelmente mais ativos frente a determinado **alvo farmacológico**.

Quando não é possível obter a estrutura tridimensional do receptor, ainda que por técnicas sofisticadas de predição de estruturas de macromoléculas, então o **método baseado na estrutura do ligante** é empregado.

Introduction to Molecular Docking

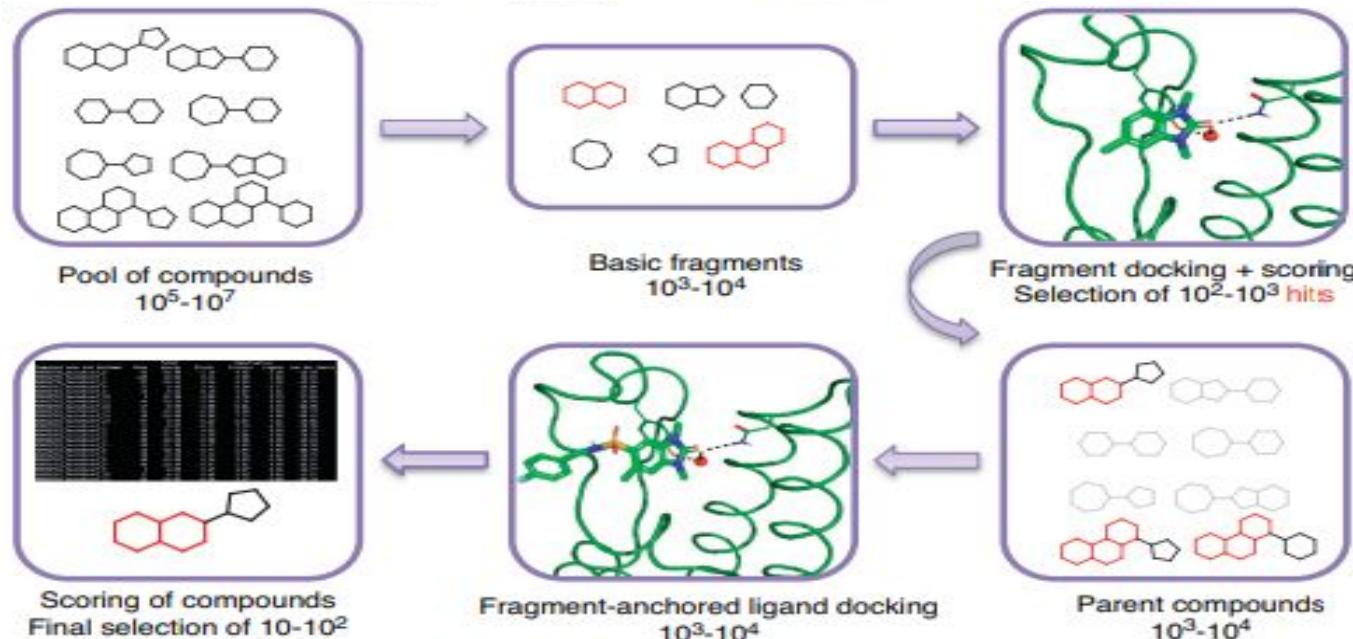
Virtual Screening



Os compostos selecionados, conhecidos como **hits**, são encaminhados para as etapas de **síntese química** (no caso de compostos apenas planejados ou não disponíveis para compra) e estudos de **atividade farmacológica** (testes *in vitro* e *in vivo*).

Introduction to Molecular Docking

Virtual Screening



Introduction to Molecular Docking

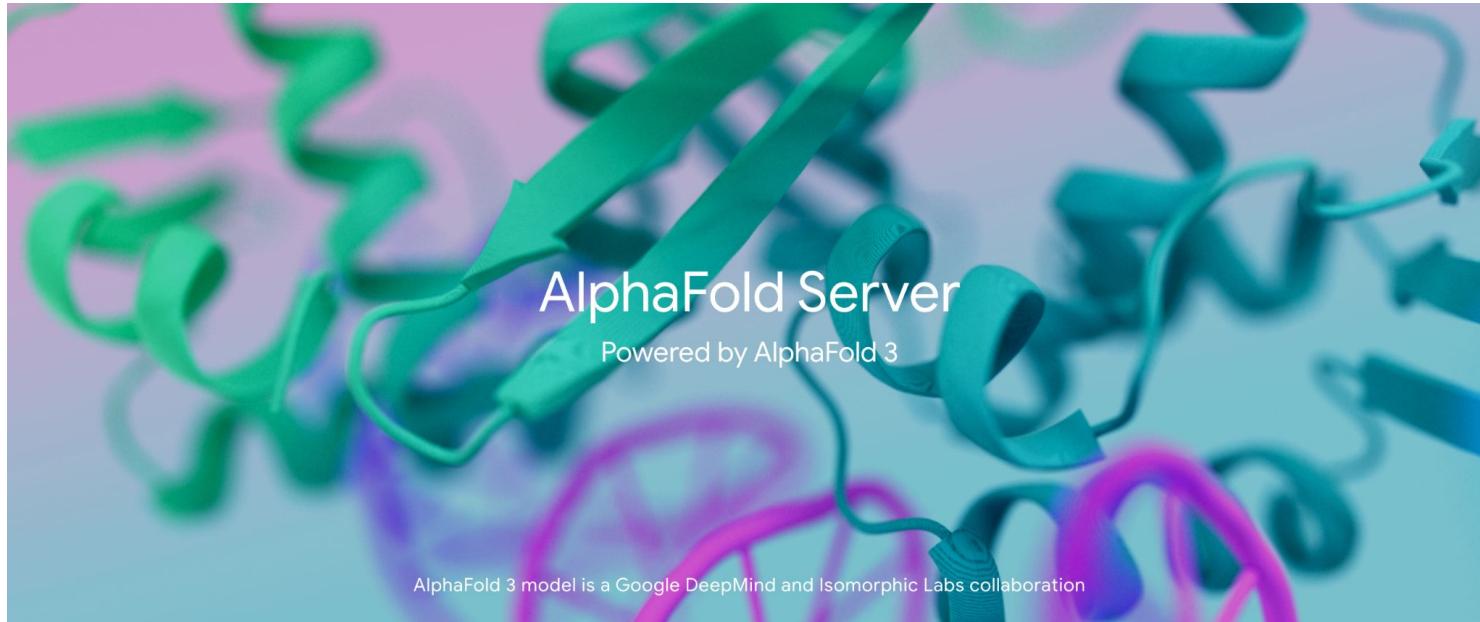
The Rise of Deep Learning in Molecular Docking

- **AlphaFold 3:**

- Desenvolvido pelo Google DeepMind e Isomorphic Labs.
- Prevê a estrutura e as interações de uma vasta gama de moléculas biológicas, incluindo proteínas, DNA, RNA e ligantes de pequenas moléculas.
- 50% mais preciso que os melhores métodos tradicionais no benchmark PoseBusters.
- O modelo e um servidor de fácil utilização estão disponíveis para uso acadêmico não comercial.

Introduction to Molecular Docking

The Rise of Deep Learning in Molecular Docking



<https://alphafoldserver.com>

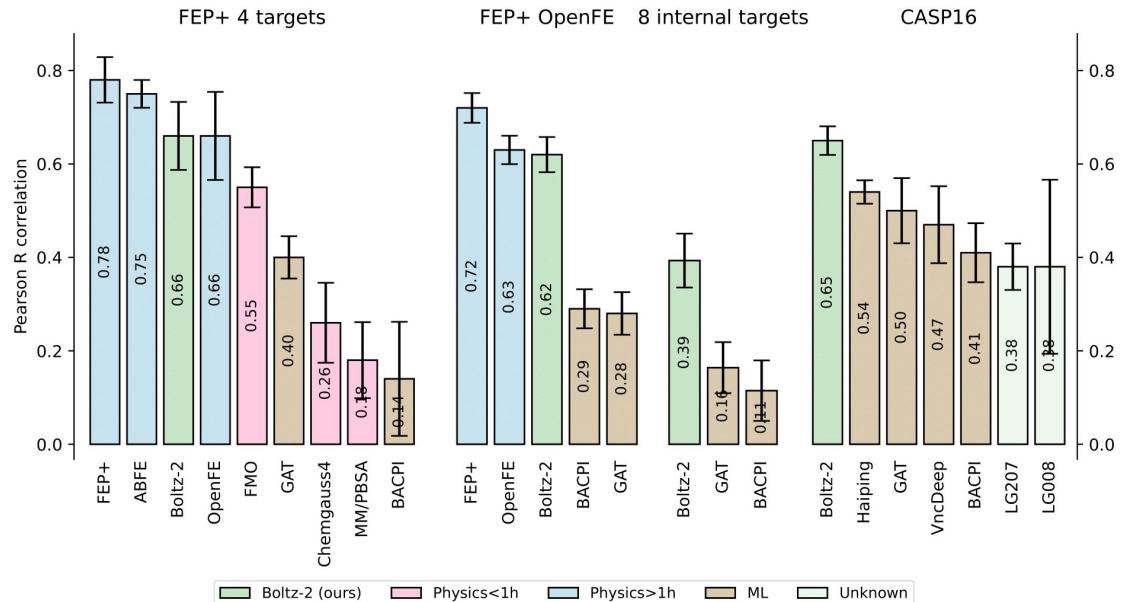
Introduction to Molecular Docking

The Rise of Deep Learning in Molecular Docking

- **Boltz2:**
 - Desenvolvido pelo MIT e pela Recursion.
 - Prevê tanto a estrutura das interações moleculares quanto a afinidade de ligação entre as moléculas.
 - Mais de 1000 vezes mais rápido que os métodos tradicionais baseados em física, como a perturbação de energia livre (FEP).
 - De código aberto sob a licença do MIT para uso acadêmico e comercial.

Introduction to Molecular Docking

The Rise of Deep Learning in Molecular Docking



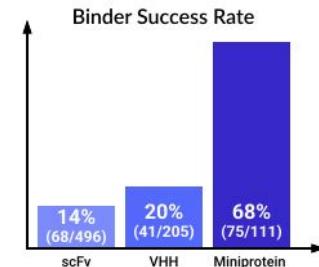
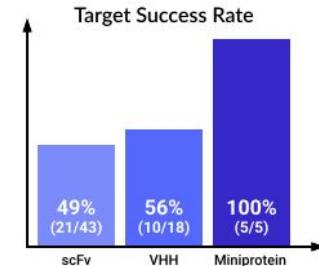
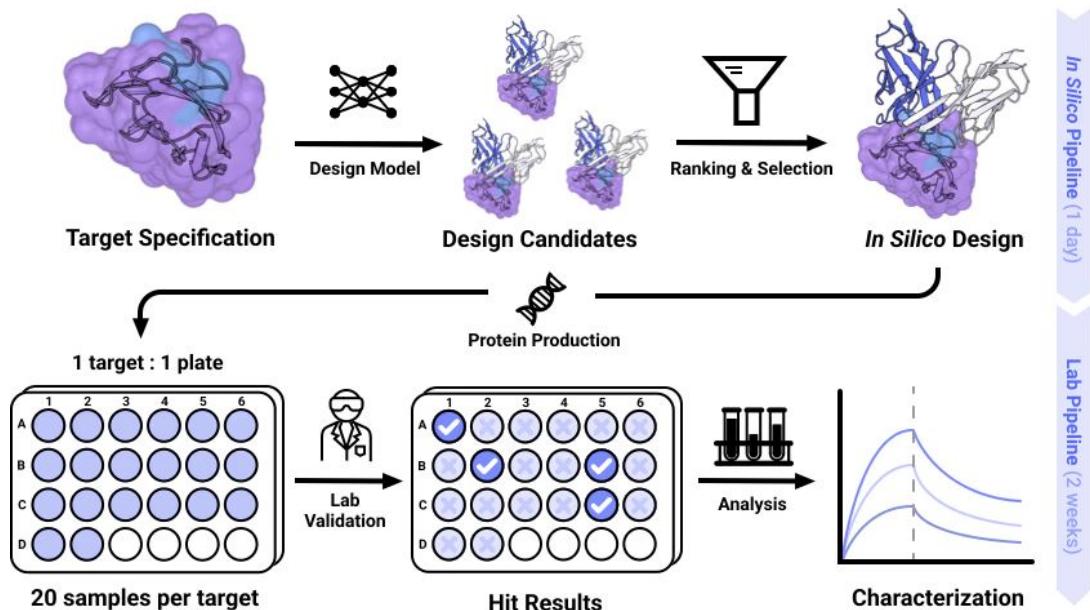
Introduction to Molecular Docking

The Rise of Deep Learning in Molecular Docking

- **Chai-2:**
 - Desenvolvido pela Chai Discovery.
 - Um modelo de IA generativo multimodal para criar novos anticorpos e outros ligantes baseados em proteínas de novo.
 - Pode comprimir os prazos de descoberta de compostos promissores de meses ou anos para apenas duas semanas.
 - Projeta novas moléculas em vez de fazer o docking de moléculas existentes.

Introduction to Molecular Docking

The Rise of Deep Learning in Molecular Docking



Introduction to Molecular Docking

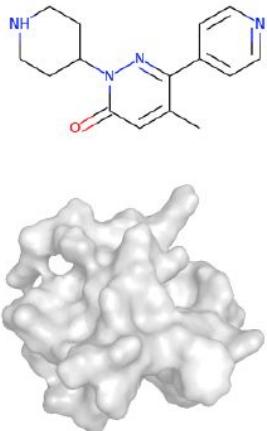
The Rise of Deep Learning in Molecular Docking

- **DiffDock:**
 - Desenvolvido pelo MIT.
 - Aborda o docking molecular como um problema de modelagem generativa usando um modelo de difusão gerativo (DGM).
 - Taxa de sucesso significativamente maior na previsão da pose de ligação correta em comparação com os softwares de docking tradicionais e outros métodos de aprendizado profundo.
 - Mais rápido que os métodos tradicionais baseados em busca, tornando-o mais prático para a triagem virtual em larga escala.

Introduction to Molecular Docking

The Rise of Deep Learning in Molecular Docking

ligand &
protein

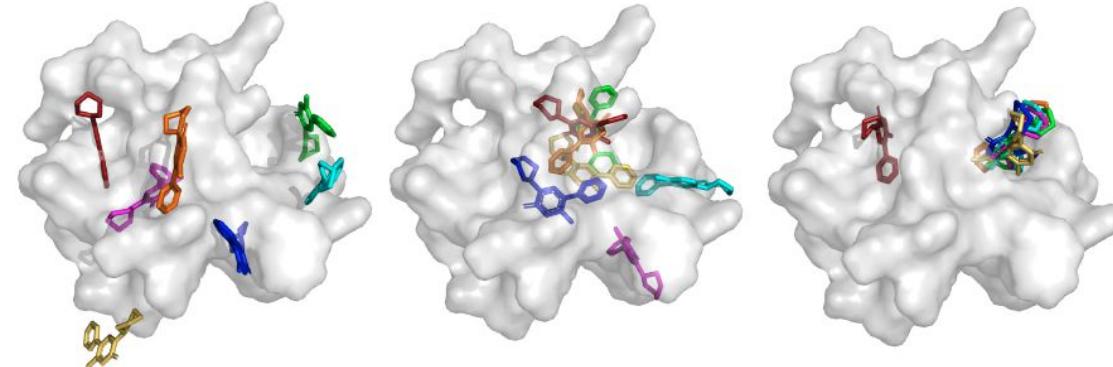


DIFFDock

t=T

reverse diffusion over
translations, rotations and torsions

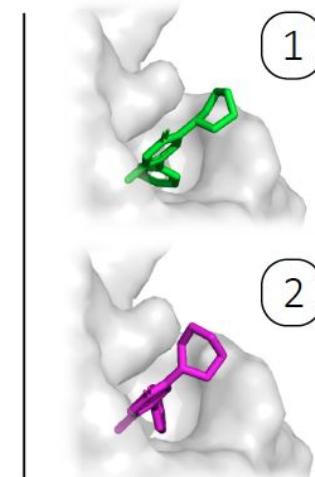
t=0



ranked poses &
confidence score

1

2



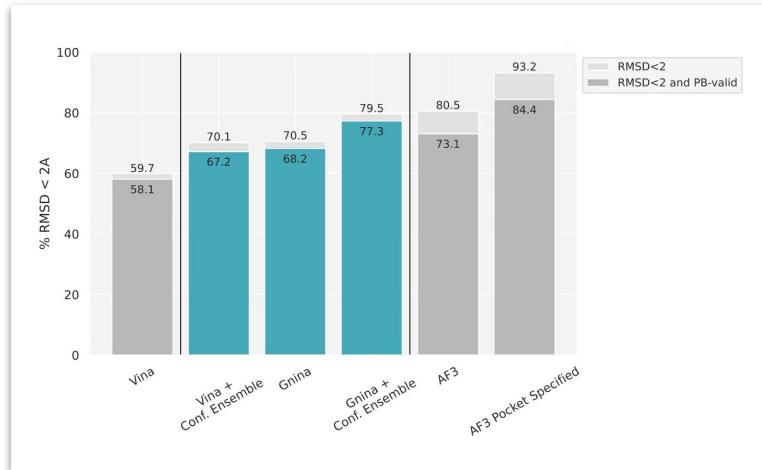
Introduction to Molecular Docking

The Rise of Deep Learning in Molecular Docking

Approaching AlphaFold 3
docking accuracy in 100 lines
of code

By Alex Rich, Ben Birnbaum, and Josh Haimson

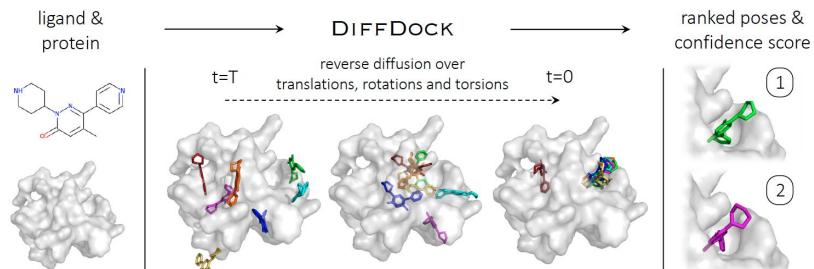
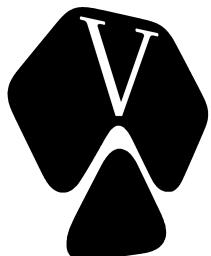
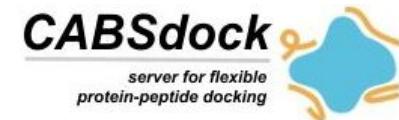
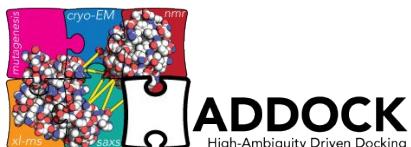
<https://github.com/inductive-bio/strong-docking-baseline>



<https://inductive.bio/blog/strong-baseline-for-alphaFold-3-docking>

Introduction to Molecular Docking

Softwares



Introduction to Molecular Docking

Bibliografia Complementar

 International Journal of Molecular Sciences

Review

Molecular Docking: Shifting Paradigms in Drug Discovery

Luca Pinzi * and Giulio Rastelli 

<https://bitlyli.com/maacYbl>

 MDPI

REVIEW

Drug Discovery Today • Volume 23, Number 8 • August 2018

 ELSEVIER

CONTINUATION OF:  ELSEVIER

Protein-peptide docking: opportunities and challenges

Maciej Ciemny^{1,2}, Mateusz Kurcinski¹, Karol Kamel³, Andrzej Kolinski¹, Nawasd Alam⁴, Ora Schueler-Furman⁴ and Sebastian Kmiecik¹

<https://bitlyli.com/OPTEJ1Y>

Visite o site do Grupo • Apresentação • Galeria de Figuras

 Bioinformática: da Biologia à Flexibilidade Molecular por Hugo Verí e Colaboradores

 Centro de Bioinformática, UFSCRS

Bioinformática: da Biologia à Flexibilidade Molecular

Bioinformática: da Biologia à Flexibilidade Molecular emprega uma definição abrangente para bioinformática, envolvendo qualquer técnica computacional aplicada ao estudo de sistemas biológicos. Busca, por conseguinte, oferecer uma percepção multidisciplinar da área, abordando tanto aspectos relacionados à sequenciamento genômico quanto à estrutura e dinâmica das interações entre proteínas e outras moléculas. Adicionalmente, considerando que técnicas experimentais baseadas no uso de computadores devem, idealmente, ter seus resultados validados por experimentos de verificação empíricas, este livro também inclui capítulos com alguns dos métodos mais frequentemente empregados na validação dos números que os programas nos oferecem.



<https://www.ufrgs.br/bioinfo/ebook/>

Molecules 2015, 20, 13384-13421; doi:10.3390/molecules200713384

OPEN ACCESS

molecules

ISSN 1420-3049

www.mdpi.com/journal/molecules

Review

Molecular Docking and Structure-Based Drug Design Strategies

Leonardo G. Ferreira *, Ricardo N. dos Santos, Glaucius Oliva and Adriano D. Andricopulo *

<https://bitlyli.com/C1c5mOY>

 ELSEVIER

CONTINUATION OF:  ELSEVIER

Current Opinion in Structural Biology

Volume 48, February 2018, Pages 93-102

Protein structure-based drug design: from docking to molecular dynamics

Pawel Śledz , Amedeo Caflisch 

<https://bitlyli.com/ow8VLJs>

Introduction to Molecular Docking

Parte Prática - Docking Simples

- 1) Preparação do receptor;
- 2) Preparação do ligante;
- 3) Construção do Grid-box no receptor;
- 4) Docking com função de score do Vina;
- 5) Seleção da melhor pose.

Notebook



SCAN ME

Introduction to Molecular Docking

Parte Prática - Docking Simples

Input Files:

Receptor PDB ID: **3HTB**

Ligand Smiles: **CCCC1=CC=CC=C1O**

Grid Box:

centerX: **23** centerY: **-25** centerZ: **-3**

sizeX: **10** sizeY: **10** sizeZ: **10**

Notebook

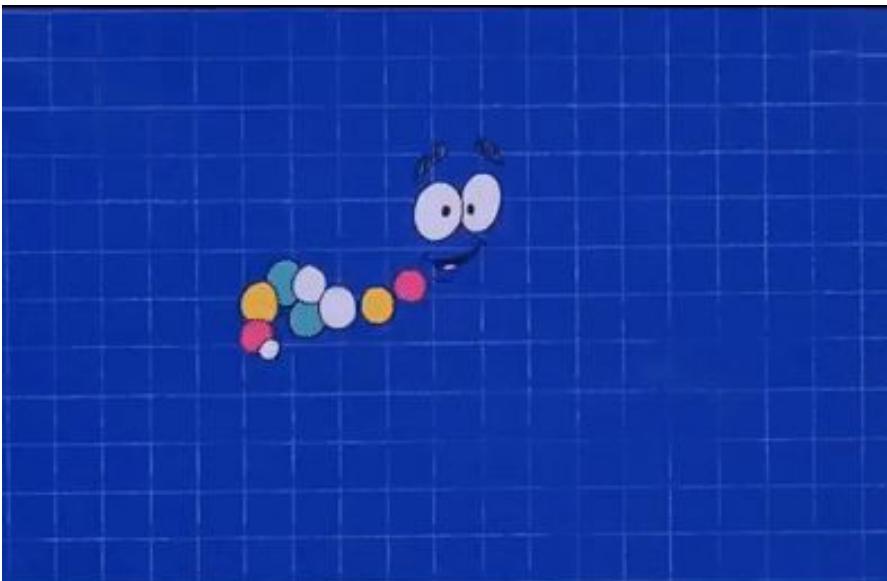


pablitoarantes@gmail.com
pablo.arantes@ems.com.br
<https://pablo-arantes.github.io>

 website



 SCAN ME



 twitter



 SCAN ME

Obrigado!

