

autodock vina:  
<http://vina.scripps.edu/>

download autodock vina:  
<http://vina.scripps.edu/download.html>

mgltools:  
<http://mgltools.scripps.edu/>

download mgltoos:  
<http://mgltools.scripps.edu/downloads>

Ξενιστής:  $\beta$ - ή  $\alpha$ -κυκλοδεξτρίνη. Ευκολος τρόπος: Ανοίξτε cif ως κείμενο. Κρατήστε μόνο ατομικές συντεταγμένες κυκλοδεξτρίνης. Ανοίξτε τώρα το cif (που έχει μόνο την κυκλοδεξτρίνη) με mercury σβήστε τις 2πλες θέσεις π.χ. κάποιων O6 ή/και C6 και σώστε ως pdb.

<http://pubchem.ncbi.nlm.nih.gov/>

p-coumaric

SDF: 3D SDF save

open .sdf file με Mercury και save as .pdb

Παρακολουθήστε: vina\_tutorial.wmv

(1:20)

download mgltoos:  
<http://mgltools.scripps.edu/downloads>

download autodock vina:  
<http://vina.scripps.edu/download.html>

pymol Σας το δίνω εγώ ή <http://pymol.org/educational>

(2:00) Theory

(3:45)

Autodock Tools → File (Menu) → Read Molecule -> beta\_CD.pdb

Edit(Menu) --> Hydrogens → Add → Polar only

Grid → Macromolecule → Choose → beta\_CD → Select a molecule → Save as .pdbqt

Grid → Gridbox Σημειώνουμε τις τιμές που μας ικανοποιούν  
no. of points in x dimension = 40  
no. of points in y dimension = 40  
no. of points in z dimension = 40  
x center = 7.853  
y center = 12.17  
z center = 11.517

close window

ligand → Input → open → (File name .pdb) p\_coumaric.pdb

δεξί κλικ στη beta\_CD και hide

Ligand → torsion tree → choose torsions

Ligand → output → save as .pdbqt

Close autodock tools

Με Notepad γράψτε ένα .txt file conf\_1.txt

```
=====
receptor = beta_CD.pdbqt
ligand = p_coumaric.pdbqt
out = out.pdbqt
```

```
center_x = 7.853
center_y = 12.17
center_z = 11.517
size_x = 40
size_y = 40
size_z = 40
```

```
exhaustiveness = 10
=====
```

[Στα WINDOWS]

Start → Programs → accessories ή Windows system → Command prompt

ή

από στο run ή στο search → ΓΡΑΨΤΕ: cmd

Με cd πηγαίνετε στο φάκελο που δουλεύετε, π.χ.

```
cd Documents\Kostas\autodockVina\cyclodextrin complexes
```

και type:

```
"\Program Files (x86)\The Scripps Research Institute\Vina\vina.exe" --config
conf_1.txt --log log.txt
```