

CAPITULO 6. RESULTADOS

A continuación se muestran los principales resultados obtenidos en el proyecto molUDLAP.

También se muestra el avance del proyecto, y el trabajo a futuro por realizar; se resaltan las rutas que se siguieron y se muestran las rutas que deberían seguirse para lograr mejoras al proyecto molUDLAP.

Resultados

Se usó la API Jmol en el proyecto molUDLAP como visualizador múltiple. En la figura 15 se muestra una proteína y un ligando logrado en Jmol.

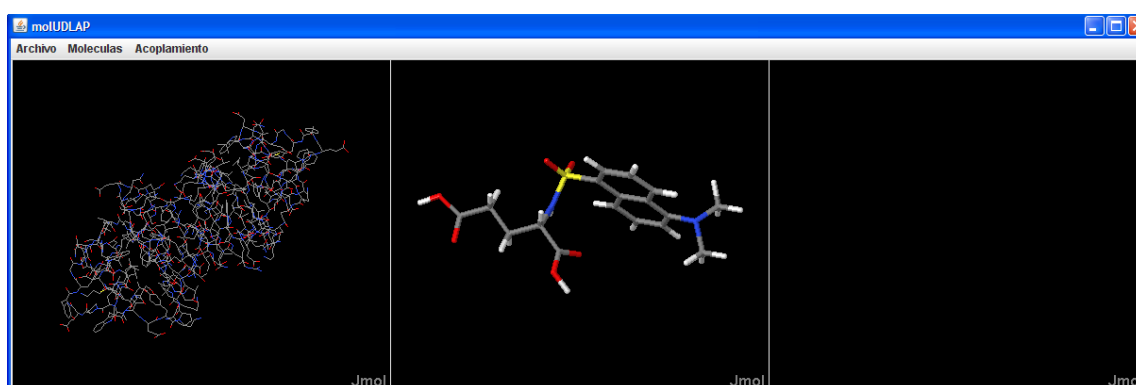


Figura15. Visualización múltiple en molUDLAP, se muestra una proteína (dock) al lado izquierdo, y un ligando (key) en medio de la imagen.

Se ha logrado fragmentar una molécula en cadenas con ayuda del API CDK y que esta sea visualizada simultáneamente con su ligando en la misma ventana de Jmol. Con esta comienza la simulación, ver figuras 16 y 17.

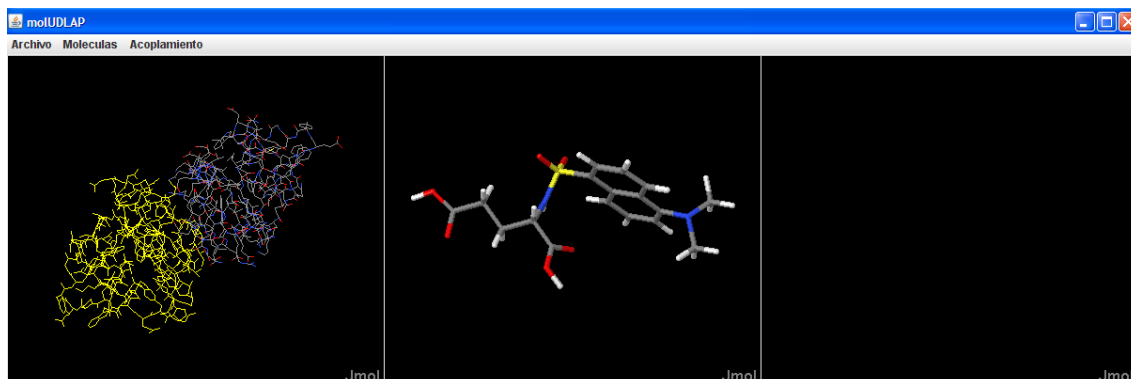


Figura 16. Visualización múltiple en molUDLAP, al lado izquierdo se muestra una proteína (dock), fragmentada en cadenas, donde el usuario escogerá la que más le convenga para la simulación de Acoplamiento Molecular, y un ligando (key) en medio de la imagen.

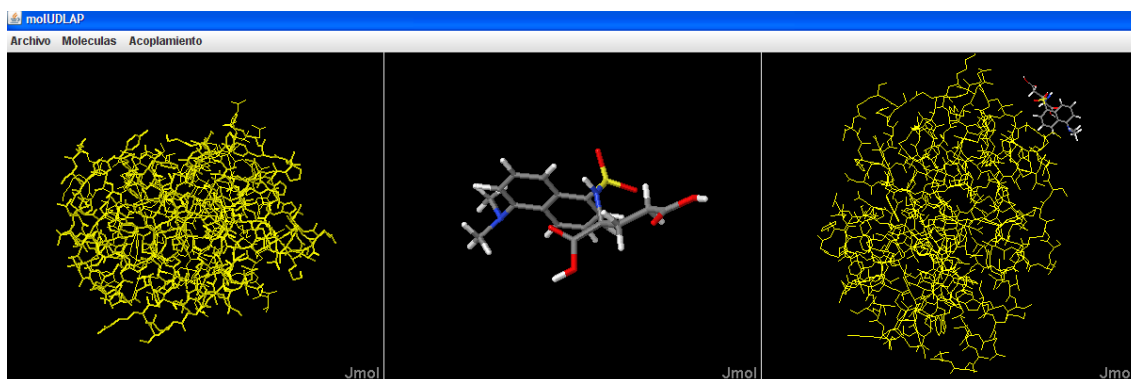


Figura 17. Visualización múltiple en molUDLAP, se muestra una proteína (dock) al lado izquierdo, un ligando (key) en medio de la imagen, y al extremo derecho se muestra la cadena seleccionada de la proteína a trabajar junto con su ligando, es en esta parte de la ventana donde se será mostrada la animación y simulación de Acoplamiento Molecular

En la figura 18 se muestra el menú con los datos de entrada que tiene molUDLAP. También se logra esta visualización con Jmol.

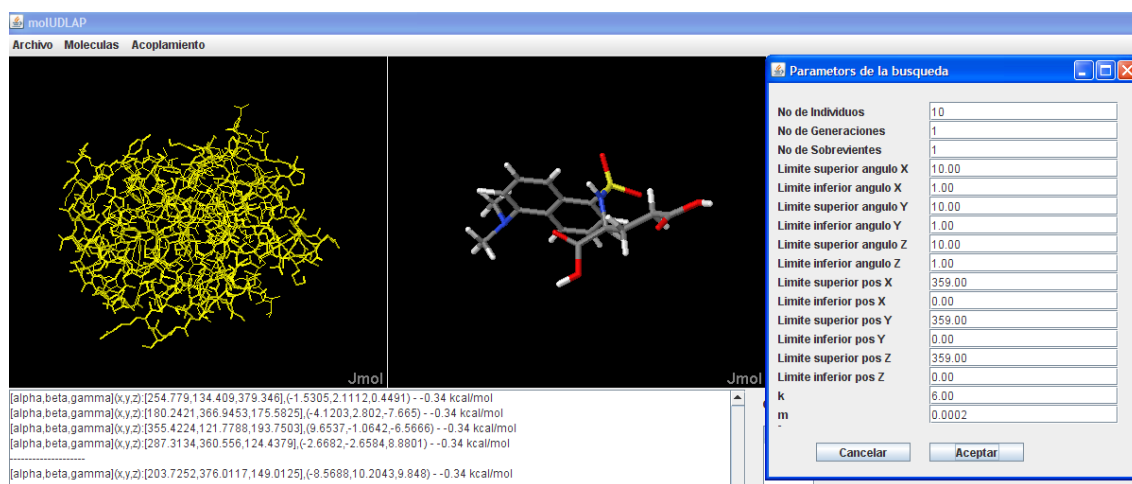


Figura 18. Parámetros de entrada de molUDLAP

En la figura 19 se muestra la preparación de las moléculas que van a interactuar.

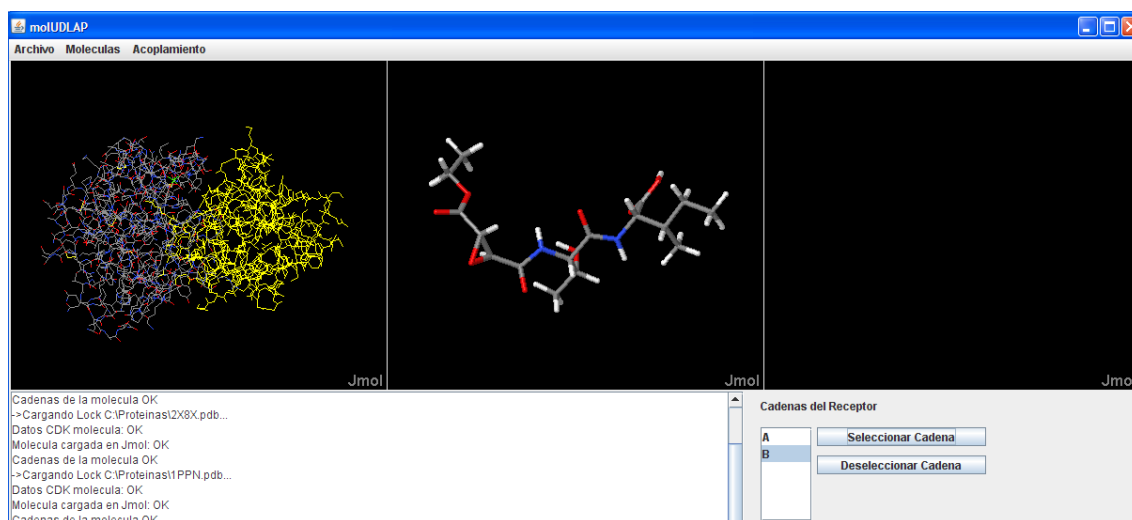


Figura 19. Preparación de las dos moléculas que van a interactuar

En la figura 20 se muestran los resultados que se obtienen una vez que se ha corrido la optimización de la función de energía.

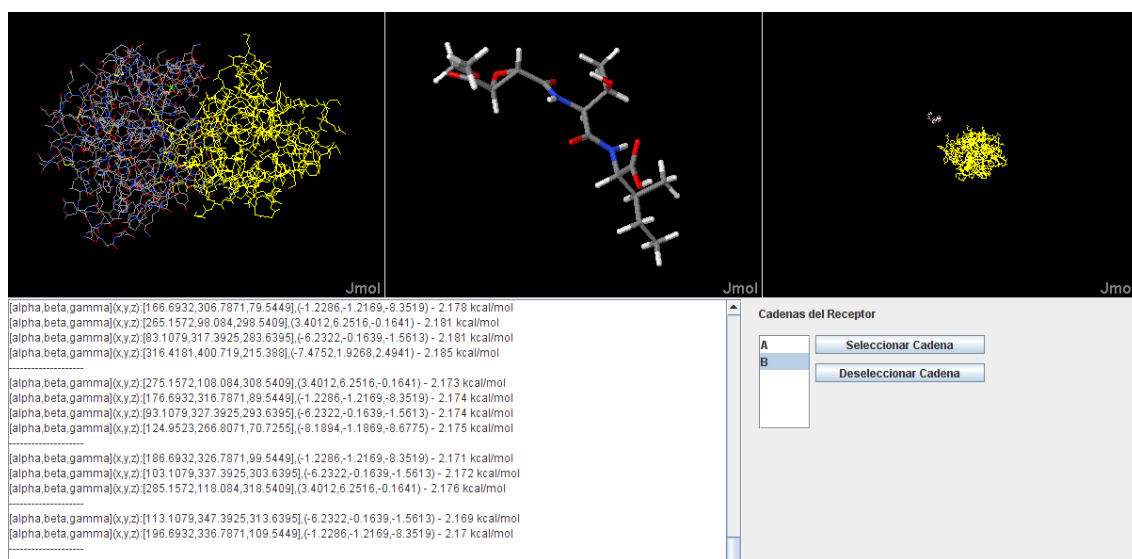


Figura 20. Resultado obtenido después de una corrida en molUDLAP De la figura se puede observar que el programa coloca las moléculas en la última posición (mejor configuración), y en la ventana de eventos se muestran los resultados en números (centro y orientación del ligando); mientras que en la ventana del ligando este gira y se coloca en su mejor posición.