

ABREVIATURAS

1A9U	código en el <i>Protein Data Bank</i> de la MAPk p38 α con el ligando SB203580
χ^2	análisis estadístico de residuales, chi cuadrada
a_acc	átomos aceptores de puentes de hidrógeno
ADT	auto dock tools
AMBER	<i>mechanical molecular forcefield</i> , diseñado para proteínas
a_nS	número de átomos de azufre
ATF2	factor 2 activador de transcripción
ATP	trifosfato de adenosina
b_ar	número de enlaces aromáticos
b_double	número de dobles enlaces
chi1_C	descriptor de conectividad
CSAID	<i>citokine supressor antiinflammatory drug</i> , fármacos supresores de citocinas
CYP450	citocromo P450
Elk1	proteína Ets-like 1
ERK	cinasa regulada extracelularmente
GA	algoritmo genético tradicional darviniano
GA-LS	algoritmo genético híbrido con búsqueda local
IL-1β	interleucina 1 – beta
ICE	enzima convertidora de proIL-1 β
JNK/SAPK	cinasa amino terminal c-Jun / cinasa activada por estrés
LGA	algoritmo genético lamarckiano

LOO	<i>leave one out</i>
LPS	lipopolisacárido
LS	búsqueda local (<i>local search</i>)
MAP	proteína activada por mitógeno
MAPk	proteína cinasa activada por mitógenos
MAPk p38α	proteína cinasa activada por mitógeno de la familia p38 isoforma alfa
Met109	aminoácido metionina en posición 109 del receptor del modelo 1A9U.pdb
MKK3	MAP cinasa cinasa isoforma 3
MKK6	MAP cinasa cinasa isoforma 6
MMFF94s	<i>mechanical molecular forcefield</i> , diseñado para moléculas pequeñas
MOE	<i>molecular operating environment</i>
NSAID	<i>non steroidal antiinflammatory drugs</i> , antiinflamatorios no esteroideos
PCH	esquema polaridad-carga-hidrofobicidad
PDB	<i>Brookhaven Protein Data Bank</i>
PEOE_PC-	suma de todas las cargas parciales, tipo Gasteiger.
pIC₅₀	-Log de la concentración inhibitoria 50
pka	-Log de la constante de disociación ácida
QSAR	<i>quantitative structure activity relationship</i>
Ras-GTP	proceso de activación celular Ras-Trifosfato de Guanina
SA	método de Monte Carlo (<i>simulated annealing</i>)
SAR	<i>structure activity relationships</i>
SB203580	ligando inhibidor de la MAPk p38 α elaborado por Gallagher y sus colaboradores.
Ser189	aminoácido serina en posición 189 del receptor del modelo 1A9U.pdb

SK&F	empresa farmacéutica <i>Smith Kline & French</i>
SK&F86002	ligando inhibidor de la MAPk p38 α sintetizado por SK&F
std_dim2	<i>standard dimension 2</i>
TACE	enzima convertidora de pro-TNF α
TNF-α	factor de necrosis tumoral alfa
Thr181	aminoácido treonina en posición 181 del receptor del modelo 1A9U.pdb
Tyr182	aminoácido tirosina en posición 182 del receptor del modelo 1A9U.pdb
UV	luz ultravioleta
Z	análisis estadístico de valores z
\$PRED	valor de pIC ₅₀ calculado por la ecuación lineal
\$RES	diferencia entre el valor de pIC ₅₀ experimental y pIC ₅₀ calculado por la ecuación lineal de MOE
\$Z-SCORE	valor de Z para los ligandos