

Capítulo 2. OBJETIVOS

2.1 OBJETIVO GENERAL

Evaluar el espacio fisicoquímico de la proteína MAPk p38 α y sus ligandos como inhibidores del modelo 1A9U utilizando herramientas *in silico*.

2.2 OBJETIVOS ESPECÍFICOS

- a) Evaluar la variabilidad y el arsenal de modificaciones químicas posibles en los ligandos para la afinidad de la MAPk p38 α .
- b) Ajustar los ligandos al sitio de unión para valorar las moléculas que interactúan, utilizando el modelo MOE del ligando SB203580 con la MAPk p38 α como método comparativo.
- c) Analizar los ligandos por métodos QSAR para determinar los más eficaces como moléculas inhibidoras de la MAPk p38 α .
- d) Interpretar los resultados, relacionando los resultados QSAR con las interacciones moleculares que se presenta en el modelo MOE.
- e) Desarrollar un modelo predictivo mediante una ecuación desarrollada con la influencia de las características fisicoquímicas de los ligandos y la MAPk p38 α .