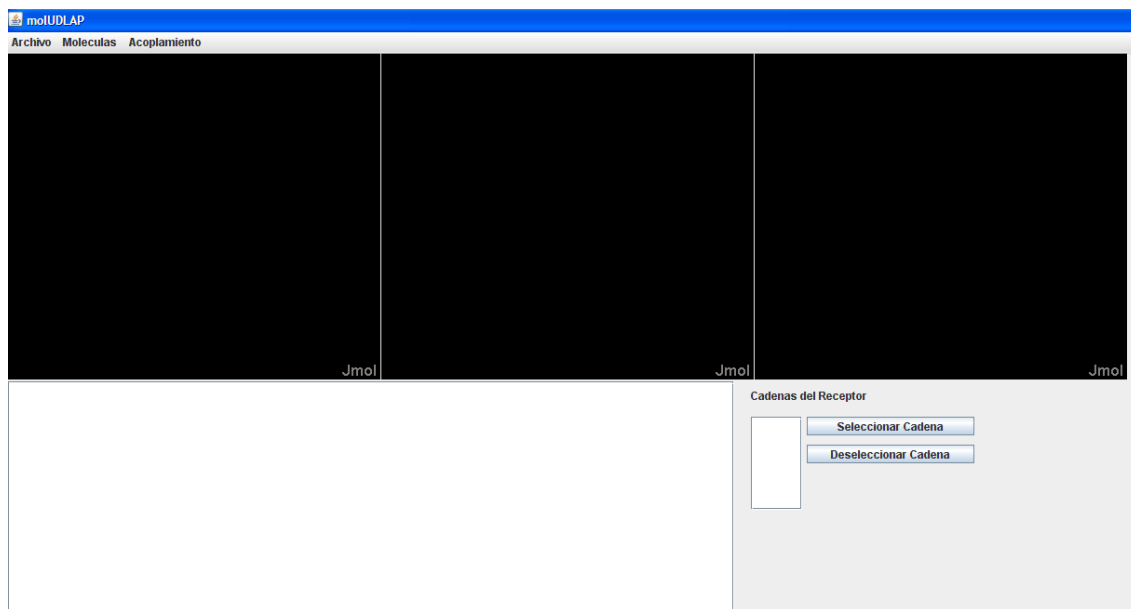


## ANEXO

### SOBRE EL FUNCIONAMIENTO DE molUDLAP.

El programa consta de lo siguiente:



**Figura 21. Vista general de molUDLAP.**

Se tienen 3 menús, donde el menú archivo sirve para salir de la aplicación, mientras que en Moléculas viene las opciones para cargar las moléculas key y lock, finalmente en el menú Acoplamiento se encuentran las opciones para trabajar con los parámetros de la búsqueda (datos de entrada para iniciar la simulación) y ver el espacio de acoplamiento que es la indicación para correr el programa.

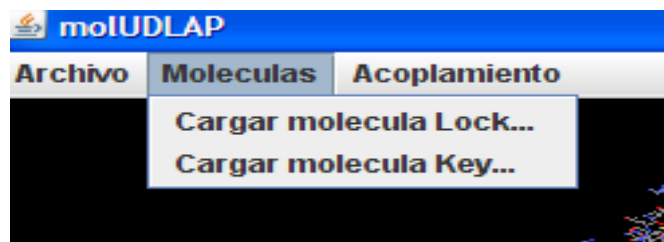


Figura 22. Menú para cargar moléculas en molUDLAP

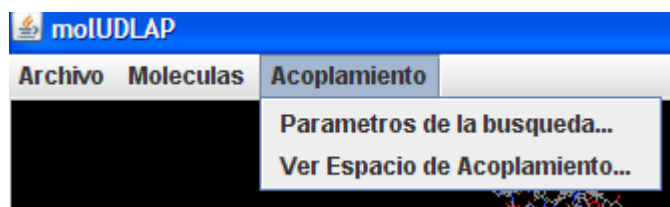


Figura 23. Menú para preparar la simulación del programa.

A la izquierda de los botones de seleccionar cadena y deseleccionar cadena se encuentra una pequeña ventana donde se visualizan las cadenas que conforman a cada una de las proteínas con las que se requiera trabajar, estos botones nos permiten interactuar con esta ventana, el usuario tendrá que seleccionar la cadena deseada y oprimir el botón de selección para que así el sistema la deje identificada y lista para comenzar la simulación.

A continuación se muestra la selección de una cadena en molUDLAP.

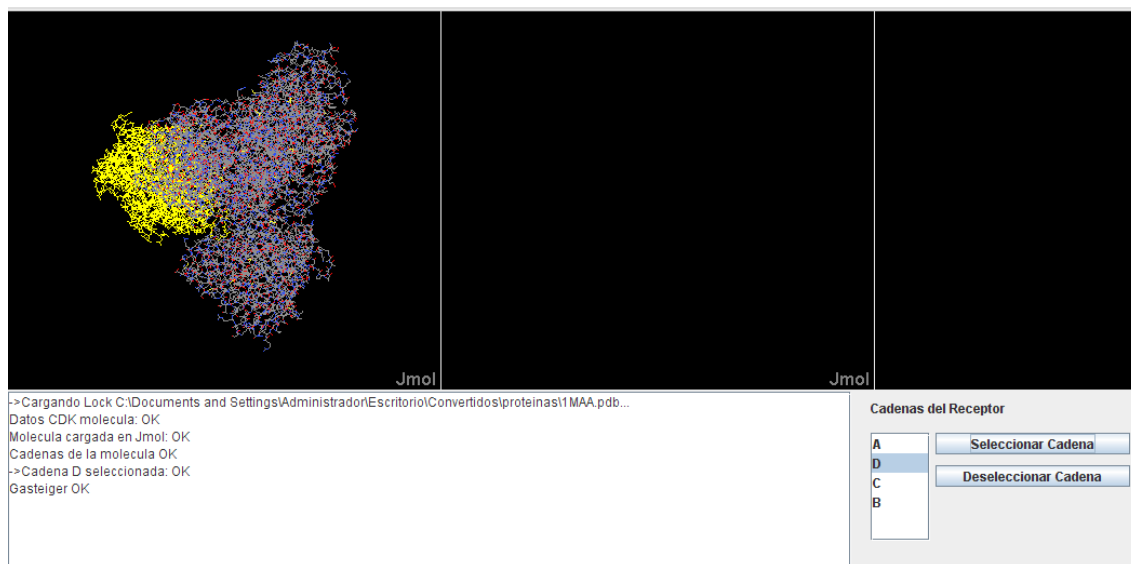


Figura 24. Seleccionando cadenas en molUDLAP.

Finalmente, en la parte inferior izquierda se cuenta con un área de visualización de eventos, lo que sirve para que el usuario vea los eventos que se vayan efectuando al momento de trabajar con molUDLAP, además es en esta misma ventana donde se muestran los resultados, mismos que serán guardados en un archivo en carpeta (el usuario tiene que haber creado dicha carpeta) para que el usuario pueda verificar los resultados.

```
->Cargando Lock C:\Documents and Settings\Administrador\Escritorio\Convertidos\proteinas\1MAA.pdb...
Datos CDK molecula: OK
Molecula cargada en Jmol: OK
Cadenas de la molecula OK
->Cadena D seleccionada: OK
Gasteiger OK
```

**Figura 25. Sección de eventos y muestra de resultados en molUDLAP.**

**NOTA:** El usuario deberá de crear una carpeta con el nombre de “test” en la unidad C de su computadora, en esta carpeta es donde serán enviados todos los archivos creados, hay que tomar en cuenta que el usuario una vez terminada cada simulación obtendrá un archivo enviado a la carpeta c:\test\, sin embargo este archivo siempre tendrá el mismo nombre, por lo que el usuario deberá de cambiar el nombre del archivo de salida y guardarlo en donde desee.