

INDICE

TEMA	PÁGINA
Capitulo 1. Resumen	1
Capitulo 2. Introducción	3
Capitulo 3. Objetivos	6
• Materiales y Métodos	7
Capitulo 4. Antecedentes	10
• El problema del Acoplamiento Molecular	10
• Implementaciones que existen para Acoplamiento Molecular	11
• AutoDock	12
• Gold	12
• FlexX	12
• DOCK e ICM	13
• Algunas aplicaciones de acoplamiento en el diseño de fármacos	13
• Algunos de los impactos del SW de acoplamiento	13
• Tipos de Acoplamiento Molecular	14
• Definición del problema	15
• El principio detrás del acoplamiento	16
• Tipos de interacciones	18
○ Proteína-proteína	18
○ Receptor-ligando	18
○ Ligando rígido con un receptor flexible	18

○ Ligando flexible con un receptor rígido	19
● Problemas de acoplamiento	19
● Aplicaciones que tiene el Acoplamiento Molecular	19
● Técnicas computacionales para hacer Acoplamiento Molecular	20
○ Dinámicas moleculares	20
○ Métodos de Monte Carlo	20
○ Algoritmos Genéticos	21
○ Métodos basados en fragmentos	21
○ Métodos de punto complementario	22
○ Métodos de distancia geométrica	22
○ Búsquedas Tabú	23
○ Búsquedas sistemáticas	23
● La función de puntuación en el Acoplamiento Molecular	23
● Métodos usuales en la evaluación de la energía libre de enlace	24
● Calculo para la entropía	25
● Papel de las moléculas de agua	25
● La flexibilidad de la proteína	25
● Muestreo heurístico	26
● Evaluación comparativa de los puntos de referencia	26
● EL protein data bank (PDB)	27
○ Historia	27
○ Crecimiento	28

Capitulo 5. Desarrollo	29
• El proceso del Acoplamiento Molecular	29
• Aspectos del Acoplamiento Molecular	31
• Algoritmos de Búsqueda	31
• Grid	31
• Funciones de puntuación	31
• Force Fields	32
• Aspectos que se deben considerar durante la realización de un programa de Acoplamiento Molecular	32
○ Trabajo con la molécula Receptor	32
○ Trabajo con la molécula ligando	33
○ Función de Energía	34
• Formula implementada en molUDLAP	35
• Calibración de la formula implementada en molUDLAP	36
• Algoritmo de Búsqueda	37
• Apis de java disponibles para la implementación de programas de química-informática	38
○ Jmol	38
○ Prestaciones de Jmol	38
○ CDK (Chemistry Development Kit)	42
○ Meshi	43
• Desarrollo de la aplicación	43
• Partes que contiene el proyecto molUDLAP	45
○ Aspectos importantes en el desarrollo de molUDLAP	45
○ Rotación y traslación de la molécula key	46

○ Carga de las moléculas	49
○ Función de optimización de energía	53
○ Algoritmo de búsqueda	56
Capitulo 6. Resultados	58
• Resultados	58
Capitulo 7. Conclusiones	62
• Logros Del Proyecto	64
• Trabajo a Futuro	65
• Citas Bibliográficas	66
Anexo	74