

Universidad Veracruzana

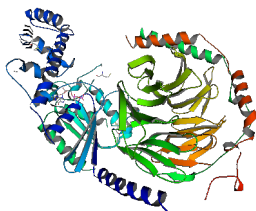
Centro de Investigaciones Cerebrales
Computación Científica y Bioinformática

"Resultados del Acoplamiento Molecular tipo Docking"

Psic. Lázaro Salomón Lara

Profesores: Dr. Gonzalo Aranda Abreu, Dr. Adolfo
Centeno

El acoplamiento molecular automatizado tiene como objetivo proponer un modelo de unión entre dos moléculas. Este método ha sido útil en química farmacéutica y en el descubrimiento de nuevos fármacos por medio del entendimiento de las fuerzas de interacción involucradas en el reconocimiento molecular.



Se hizo uso del software "AutoDockTools" para modelar el Acoplamiento Molecular entre la Proteína S de superficie (Spike Protein) del virus SARS-Cov2 y el fármaco Amantadina



El procedimiento se realizó tal cual se presenta descrito en el manual "Using AutoDock 4 and AutoDock Vina with AutoDockTools: A Tutorial" de Ruth Huey, Garrett M. Morris y Stefano Forli, del Scripps Research Institute Molecular Graphics Laboratory

Se inició instalando y abriendo el software

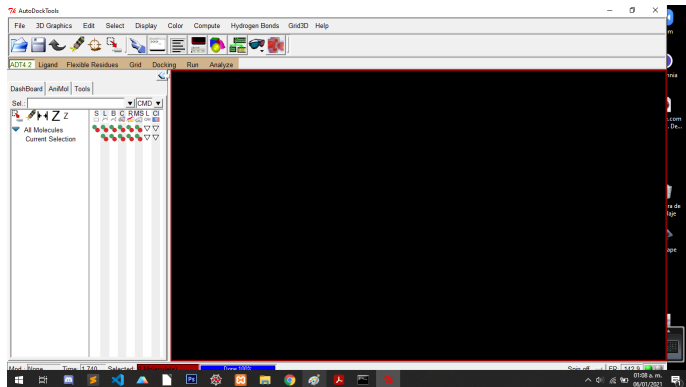


Figure: AutoDockTools

Se cargó la Proteína S del SARS-Cov2 (7ddd.pdb) con formato Protein Data Bank)

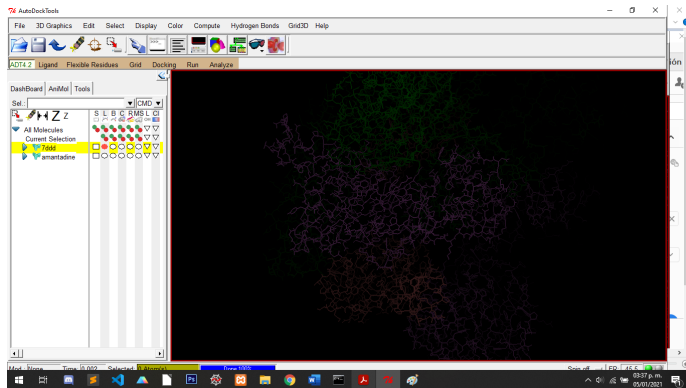


Figure: Proteína S

Se cargó el ligando Amantadina (amantadine.pdb) con formato Protein Data Bank)

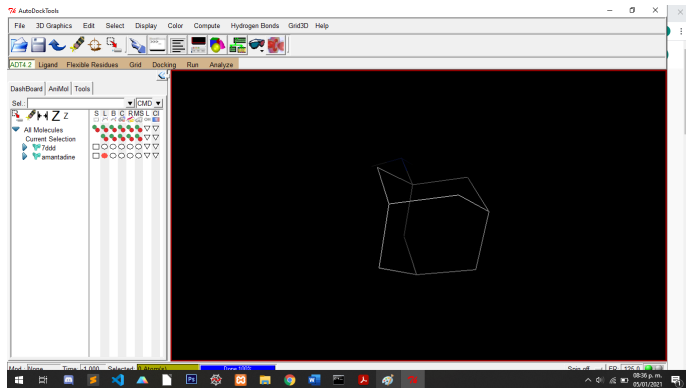


Figure: Amantadina

Se prepara el receptor, eliminando el solvatado, agregándole los hidrógenos y configurándolo como macromolécula y guardándolo en formato *.pdbqt

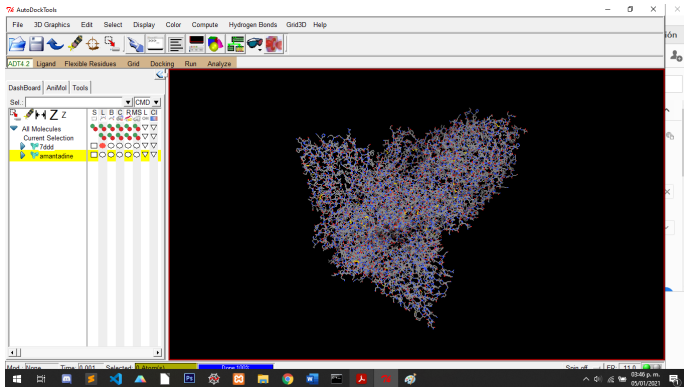


Figure: Preparando el Receptor

Se prepara el receptor definiendo el Grid Box como espacio de búsqueda, esto es, su tamaño y coordenadas

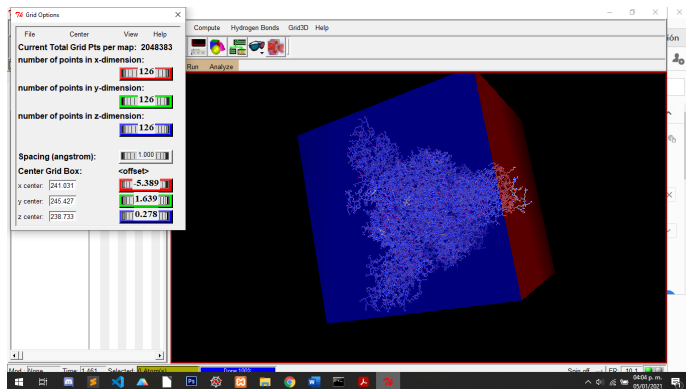


Figure: Preparando el Espacio de Búsqueda

Implementación

Se prepara el ligando, encontrando el eje de torsión, configurando el número de torsiones, definiéndolo como ligando principal de la macromolécula y guardándolo en formato *.pdbqt

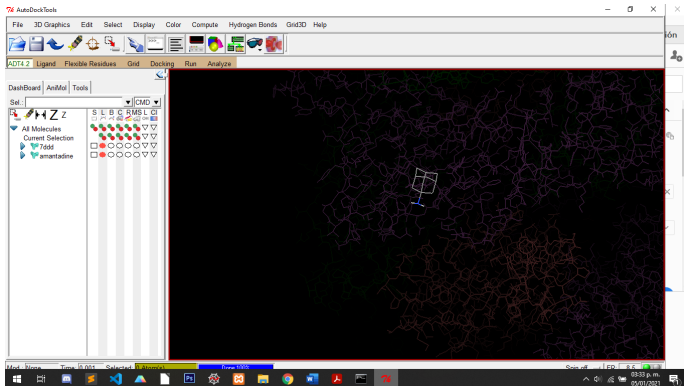


Figure: Preparando el Ligando

Se genera archivo de texto de configuración con las coordenadas del Grid Box

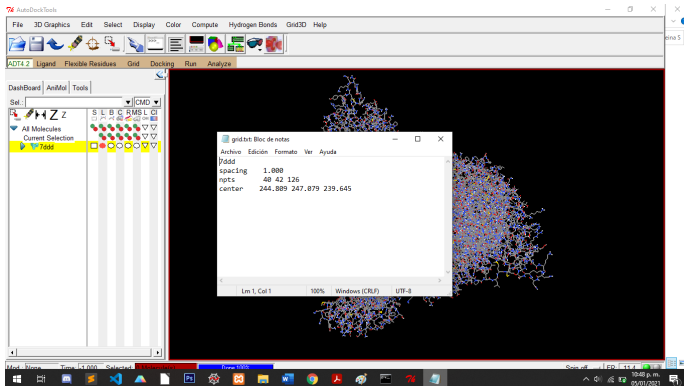


Figure: Archivo de configuración del Grid Box

Implementación

Se genera archivo de texto de configuración con el nombre de los archivos del receptor y el ligando

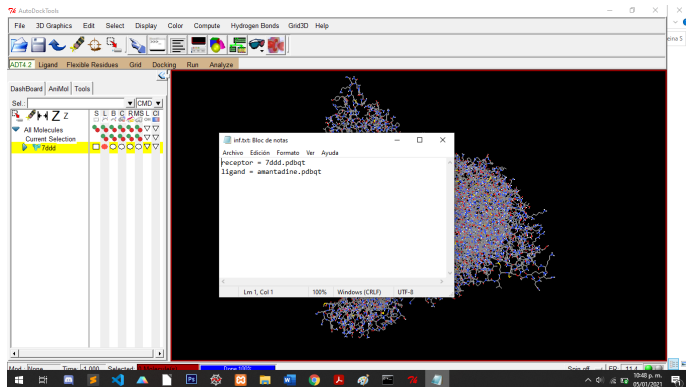


Figure: Receptor y Ligando

Intentando correr el Acoplamiento

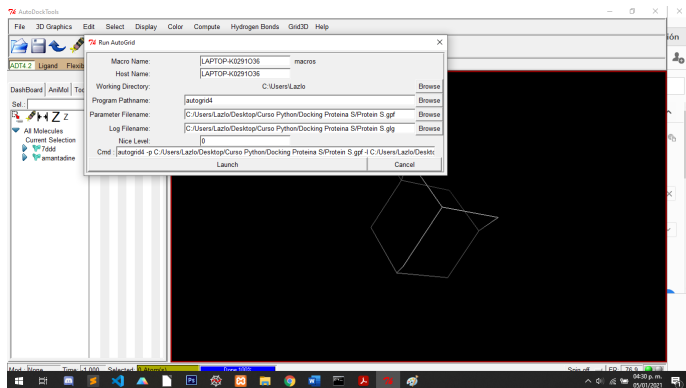


Figure: Corriendo el Acoplamiento Molecular

Error presentado. Se intentó de diversas maneras corregirlo, pero resultó imposible

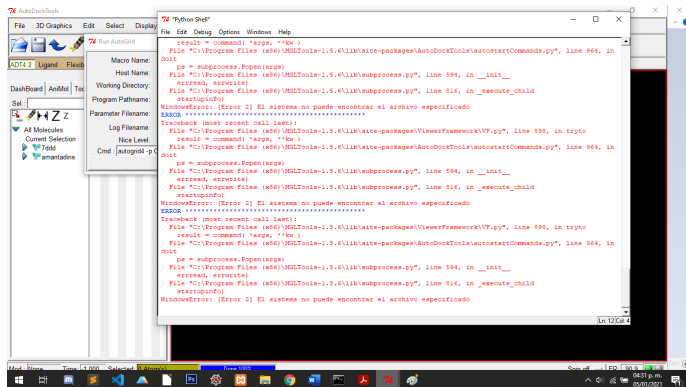


Figure: Error en el Acoplamiento Molecular