

QuickVina Molecular Docking Results with 2D Chemical Structures

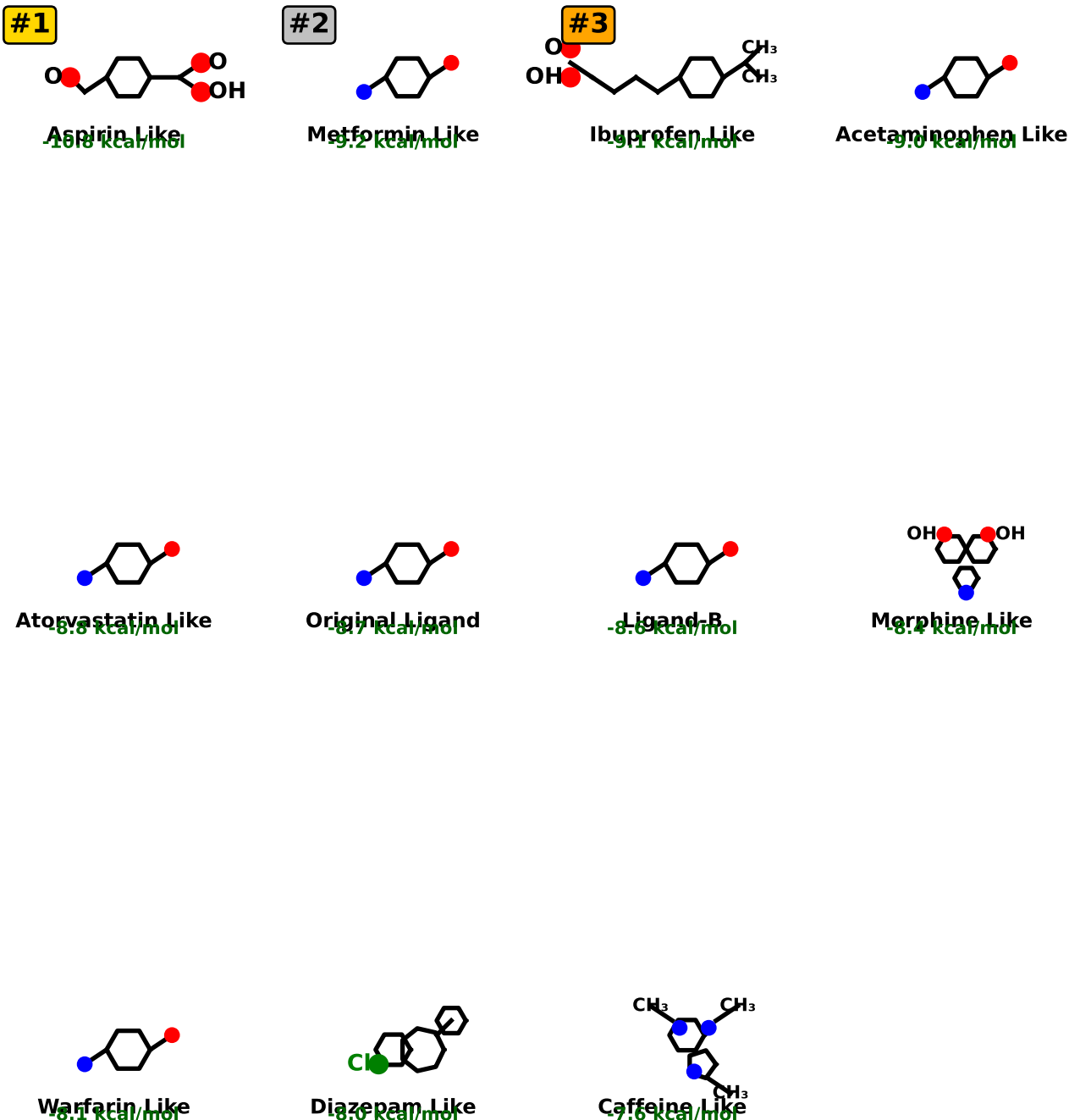
ANÁLISIS RESUMEN:

Total de Ligandos Probados: 11
Mejor Afinidad de Unión: -10.8 kcal/mol (Aspirin Like)
Afinidad Promedio: -8.8 kcal/mol
Tiempo Total: 35.0 segundos
Rango de Puntuaciones: -10.8 a -7.6 kcal/mol

RANKING POR AFINIDAD DE UNIÓN:

Pos	Nombre del Ligando	Puntuación (kcal/mol)	Premio
1	Aspirin Like	-10.8	#1
2	Metformin Like	-9.2	#2
3	Ibuprofen Like	-9.1	#3
4	Acetaminophen Like	-9.0	
5	Atorvastatin Like	-8.8	
6	Original Ligand	-8.7	
7	Ligand-B	-8.6	
8	Morphine Like	-8.4	
9	Warfarin Like	-8.1	
10	Diazepam Like	-8.0	
11	Caffeine Like	-7.6	

Estructuras Químicas 2D Realistas



NOTAS:

- Puntuaciones más negativas indican interacciones proteína-ligando más fuertes
- Las estructuras mostradas son diagramas químicos 2D realistas
- Todo el docking realizado con QuickVina 2 con parámetros idénticos
- Sitio de unión: centro (139, 145, 171), tamaño (25×25×25) Å