**EVIDENCIAS DE DOCKING MOLECULAR**

|  |
| --- |
|  |
| * Definir número de conformaciones de la ligante amantadina (ZINC000000968256), determinar grados de libertad y generar archivo. pdbqt |
| * Se preparó la diana proteica E. Selección del modelo 1 para su análisis por docking molecular de acuerdo con full report 5x29. |
|  |
|  |
| * Se definió el área de docking molecular, tamaño de rejilla y posición en plano de coordenadas X, Y, Z |
|  |
|  |