

Indice

Capítulo I

Objetivos

<u>Objetivos</u>	I-1
------------------------	-----

Capítulo II

Métodos

<u>A) Mecánica Molecular</u>	II-1
<i>Campos de Fuerza</i>	II-1
<u>B) Minimización de Energía</u>	II-5
<i>Steepest Descent</i>	II-6
<i>Gradientes Conjugados</i>	II-6
<u>C) Dinámica Molecular</u>	II-7
<i>Leap Frog</i>	II-8
<i>SHAKE</i>	II-10
<i>Introducción de Fuerzas Especiales en el sistema molecular</i>	II-13
<i>Dinámica Molecular con ajuste de temperatura y presión</i>	II-13
<u>D) Tratamiento del entorno molecular</u>	II-14
<i>Vacío y "Pseudo Vacío"</i>	II-15
<i>Solvente Explícito</i>	II-15
<u>E) Análisis de Dinámica Molecular</u>	II-16
<i>RMSD</i>	II-16
<i>B-factors</i>	II-17
<i>PMI</i>	II-17
<u>F) Gráficos Moleculares</u>	II-18

Capítulo III EgDf1

<u>E. granulosus,</u> <u>agente causante</u> <u>de la Hidatidosis</u>	III-1
<u>Modelado de EgDf1 de</u> <u>E. granulosus</u>	III-1
<i>Introducción</i>	III-1
<i>Parte experimental</i>	III-2
<u>Artículo</u>	III-5

Capítulo IV CreA

<u>Regulación de la transcripción</u> <u>en Eucariotas. Factores de</u> <u>Transcripción</u>	IV-1
<i>Aspectos Generales</i>	IV-1
<i>Factores de Transcripción</i>	IV-2
<i>Dedos de Zinc</i>	IV-2
<u>Estudio de la interacciones</u> <u>ADN-dedos de Zinc mediante</u> <u>el modelado y simulación</u> <u>dinámica molecular del factor</u> <u>de transcripción CreA</u> <u>de Aspergillus nidulans</u>	IV-3
<i>Introducción</i>	IV-3
<i>Materiales y Métodos</i>	IV-4
<i>Puntos de Partida del</i> <i>Modelado</i>	IV-5
<i>Resultados y Discusión</i>	IV-9
<i>Conclusiones.</i> <i>Implicancias Biológicas</i>	IV-12

Capítulo V Conclusiones

<u>Conclusiones</u>	V-1
<i>EgDf1 de E. granulosus</i>	V-1
<i>CreA de A. nidulans</i>	V-1
<i>Aspectos Generales</i>	V-2