

3.1	Validación de la estabilidad geométrica de los modelos de FcPL y FaPL. -----	66
3.2	Validación de la estabilidad energética de los modelos FcPL y FaPL. -----	69
4.	Análisis de la estructura tridimensional de FcPL y FaPL. -----	71
4.1	Análisis de la divergencia estructural entre los modelos y las secuencias templado. -----	71
4.2	Análisis de la conservación estructural del sitio activo. -----	74
4.3	Análisis del sitio activo y del sitio de coordinación de Ca ⁺² -----	77
4.4	Cálculo del potencial electrostático. -----	80
5.	Estudio de la interacción de dos pectato liasa de frutilla, con el sustrato modelo ácido hexa-galacturónico. -----	81
5.1	Estudios de los complejos por medio de Dinámica Molecular. -----	82
5.2	Análisis del complejo FcPL y FaPL con el ligando ácido hexa-galacturónico con iones calcio. -----	83
5.3	Análisis del sitio activo en los complejos FcPL y FaPL con el ligando con iones calcio. -----	86
5.4	Análisis del sitio de coordinación de calcio en los complejos FcPL y FaPL con el ligando con iones calcio. -----	88
5.5	Análisis del complejo FcPL con el ligando ácido hexa-galacturónico sin iones calcio. -----	90
5.6	Análisis del sitio activo en el complejo FcPL con el ligando sin iones calcio. -----	93
6.	Residuos que estabilizan la interacción proteína-ligando en los complejos FcPL y FaPL con el ligando con iones calcio. -----	94
7.	Comparación de la interacción del modelo FcPL con el ligando con y sin iones calcio. -----	96
	DISCUSIÓN. -----	98
	CONCLUSIÓN. -----	105
	REFERENCIAS. -----	107

ÍNDICE DE TABLAS

	Página
1. Producción mundial de frutillas entre los períodos 2000 y 2009. -----	14
2. Producción sudamericana de frutillas entre los períodos 2000 y 2009. ----	14
3. Elección de templados para la secuencia FcPL. -----	58
4. Elección de templados para las secuencia FaPL. -----	59
5. Predicción de estructura secundaria de FcPL -----	62
6. Predicción de estructura secundaria de FaPL -----	62
7. Divergencia estructural para todos los átomos de FcPL vs. los templados utilizados en la construcción de los modelos. -----	73
8. Divergencia estructural para todos los átomos de FaPL vs. los templados utilizados en la construcción de los modelos. -----	73

ÍNDICE DE FIGURAS

1.	Cambios de firmeza de dos especies de frutilla <i>Fragaria x ananassa</i> , y <i>Fragaria chiloensis</i> durante el desarrollo y maduración del fruto. -----	16
2.	Perfiles de expresión de un gen de pectato liasa de las especies de frutilla <i>Fragaria chiloensis</i> y <i>Fragaria x ananassa</i> . -----	17
3.	Modelo de la estructura de la pared celular vegetal. -----	15
4.	Esquema del mecanismo de β -eliminación propuesto para la enzima pectato liasa -----	19
5.	Complejo PelC R-218-K Ca^{+2} ácido tetra-galacturónico. -----	20
6.	Superposición de la estructura de PelC nativa con Ca^{+2} ácido tetra-galacturónico. -----	21
7.	Alineamiento global de secuencia entre FcPL1 y FaPL1. -----	23
8.	Modelo de la estructura tridimensional de PelC de <i>Erwinia chrysanthemi</i> . -----	25
9.	Secuencia de pasos para obtener un modelo comparativo. -----	27
10.	Minimización de energía. -----	28
11.	Métodos de minimización. -----	29
12.	Sección de la ecuación de energía de potencial que calcula las interacciones enlazantes. -----	32
13.	Sección de la ecuación de energía de potencial que calcula las interacciones no enlazantes. -----	33
14.	Condiciones periódicas de borde en dos direcciones. -----	36
15.	Ácido hexa-galacturónico con y sin iones Ca^{+2} . -----	49
16.	Alineamiento múltiple de secuencias de pectato liasa incluyendo a FcPL1 y FaPL1. -----	52
17.	Alineamiento <i>pairwise</i> entre FcPL y FaPL. -----	53
18.	Predicción de estructura secundaria de FcPL. -----	54
19.	Predicción de estructura secundaria de FaPL. -----	55
20.	Representación en modo “ <i>surface</i> ” de la estructura tridimensional de Jun A1, el alérgeno del polen de cedro (PDB: 1PXZ). -----	57