

ÍNDICE DE CONTENIDOS

Contenido	
RESUMEN	5
ABSTRACT	6
CAPÍTULO I – INTRODUCCIÓN.....	7
I.I Isoenzimas PDEs.....	9
I.II La PDE3.....	13
I.III La PDE3A y sus inhibidores	13
I.IV Hipótesis.....	19
I.V Objetivos	19
Objetivo General.....	19
Objetivos Específicos	19
CAPÍTULO II - METODOLOGIA.....	20
II.I Modelación por homología.....	20
II.I.I Inhibidores de PDE3A estudiados	22
II.II Docking.....	32
II.III Energías libre de unión usando MM/GBSA	33
II.IV Método de Montecarlo.....	34
CAPITULO III - RESULTADOS Y DISCUSIÓN.....	35
III.I Modelación de la PDE3A	35
III.II Estudios de Docking molecular.....	40
III.III Cálculos de energía libre de unión	52
III.IV Método de Montecarlo.....	55
CAPITULO IV. CONCLUSIONES	58
REFERENCIAS.....	60
ANEXOS	65
Anexo 1.....	65
Anexo 2.....	94
Anexo 3.....	95
Anexo 4.....	98

Anexo 5.....	101
Anexo 6.....	103
Anexo 7.....	106