

II.- ÍNDICE DE CONTENIDOS

DEDICATORIA	2
I.- AGRADECIMIENTOS	3
II.- ÍNDICE DE CONTENIDOS	4
III.- ÍNDICE DE TABLAS	6
IV.- ÍNDICE DE FIGURAS	7
V.- RESUMEN	8
VI.- ABSTRACT	9
VII.- INTRODUCCIÓN	10
VII.1.- Dendrímero	11
VII.2.- Ensayos	13
VII.3.- Dendrímero y pH	13
VII.4.- Dinámica Molecular	15
VII.4.1.- Condiciones Periódicas de borde	15
VII.5.- Campo de fuerza	16
VII.5.1.- Campo de fuerza CHARMM	17
VII.6.- Aproximaciones	17
VII.6.1.- Aproximación Continua	18
VII.6.2.- Aproximación Discreta	19
VII.7- APBS	19
VII.8.-Descriptores	21
VII.8.1.- Radio de giro	21
VII.8.2.- Área de la superficie accesible al solvente	22
VII.8.3.- Función de Distribución radial	22

VII.8.4.- Coeficiente de congregación	23
VIII.- HIPÓTESIS DE TRABAJO	25
IX.- OBJETIVOS	25
IX.1.- Objetivo General	25
IX.2.- Objetivos Específicos	25
X.- METODOLOGÍA	23
X.1.- Descripción del Sistema	26
X.2.- Estudio de Protonación Aminas Terminales con APBS	26
X.3.- Cambio de pH	27
X.4.- Aproximaciones	28
X.4.1.- Metodología para realizar Aproximación Continua	28
X.4.2.- Metodología para realizar Aproximación Discreta	29
XI.- RESULTADOS	30
XII.- DISCUSIÓN	38
XIII.- CONCLUSIONES	40
XIV.- REFERENCIAS	41
XV.- ANEXOS	44
XV.1.- Material suplementario	44
XV.1.1.- Archivos de Configuración para NAMD	44
XV.1.1.- Scripts creados durante el desarrollo de la memoria.	53

III.- ÍNDICE DE TABLAS

Tabla 1: Ejemplos de estructuras de dendrímeros.	11
Tabla 2: Antecedentes de resultados experimentales y teóricos del radio de giro en PAMAM G4	14
Tabla 3: Valores de las aminas	30

IV.- ÍNDICE DE FIGURAS

Figura 1: Ejemplo de un dendrímero	12
Figura 2: Estructura de un Dendrímero	13
Figura 3: PBC	16
Figura 4: Esquema del proceso en el cual se varían las cargas en la simulación continua.	18
Figura 5 : Esquema de Aproximación Discreta	19
Figura 6: Ejemplo clásico de RDF	22
Figura 7: Representación de la división de sectores para calcular el factor de congregación	23
Figura 8: Representación de los valores que entrega el factor de congregación.	24
Figura 9 : Ciclo de energía libre	27
Figura 10 : Gráfico de Radio de giro (Simulación Continua)	31
Figura 11: Gráfico de Superficie accesible al solvente (Simulación Continua)	32
Figura 12: Gráfico de funcion de distribución radial de las aguas con respecto al core (Simulación Continua)	32
Figura 13: Gráfico de funcion de distribución radial de Cl^- con respecto a las aminas terminales (Simulación Continua)	33
Figura 14: Gráfico de funcion de distribución radial de Na^+ con respecto a las aminas terminales (Simulación Continua)	33
Figura 15: Gráfico de Coeficiente de Congregación (Simulación Continua)	34
Figura 16 : Gráfico de Radio de giro (Simulación Discreta)	35
Figura 17: Gráfico de funcion de distribución radial de las aguas con respecto al core (Simulación Discreta)	35
Figura 18: Gráfico de funcion de distribución radial de Cl^- con respecto a las aminas terminales (Simulación Discreta)	36
Figura 19: Gráfico de funcion de distribución radial de Na^+ con respecto a las aminas terminales (Simulación Discreta)	36
Figura 20 : Gráfico de Coeficiente de congregación (Simulación Discreta)	37