

I. ÍNDICE GENERAL

I. ÍNDICE GENERAL 1

II. ÍNDICE DE TABLAS 3

III. ÍNDICE DE FIGURAS 4

IV. RESUMEN **Error! Bookmark not defined.**

V. ABSTRACT **Error! Bookmark not defined.**

1. INTRODUCCIÓN **Error! Bookmark not defined.**

1.1 Características de la frutilla **Error! Bookmark not defined.**

1.2 Ablandamiento del fruto **Error! Bookmark not defined.**

1.3 Estructura y composición de la pared celular **Error! Bookmark not defined.**

1.4 Xiloglucanos **Error! Bookmark not defined.**

1.5 Enzimas asociadas a la modificación de la pared celular **Error! Bookmark not defined.**

1.6 Xiloglucano endotransglicosilasa/hidrolasa (XTHs) **Error! Bookmark not defined.**

1.6.1 Estructura tridimensional de proteínas XTH **Error! Bookmark not defined.**

1.6.2 Identificación y función de aminoácidos catalíticos en enzimas XTH **Error! Bookmark not defined.**

1.7 Antecedentes preliminares **Error! Bookmark not defined.**

1.7.1 Rol de la N-glicosilación en plantas **Error! Bookmark not defined.**

1.7.2 Distribución de XGO en la pared celular **Error! Bookmark not defined.**

1.7.3 Estabilidad de un xiloglucano específico en interacción con PttXET16-34 **Error! Bookmark not defined.**

1.8 Propuesta de investigación **Error! Bookmark not defined.**

2. HIPÓTESIS **Error! Bookmark not defined.**

3. OBJETIVOS **Error! Bookmark not defined.**

3.1 Objetivo General **Error! Bookmark not defined.**

3.2 Objetivos Específicos **Error! Bookmark not defined.**

4. DESCRIPCIÓN DE LOS MÉTODOS **Error! Bookmark not defined.**

4.1 Modelamiento comparativo de las proteínas FcXTH1 y FcXTH2 **Error! Bookmark not defined.**

4.2 Minimización de energía y Dinámica Molecular **Error! Bookmark not defined.**

4.3 Glicosilación de FcXTH1 y FcXTH2 **Error! Bookmark not defined.**

4.4 Interacción Proteína – Ligando **Error! Bookmark not defined.**

4.5 Dinámica molecular de complejos proteína-ligando **Error! Bookmark not defined.**

4.6 MM-GBSA **Error! Bookmark not defined.**

5. RESULTADOS	Error! Bookmark not defined.
5.1 Modelado comparativo de FcXTH1 y FcXTH2	Error! Bookmark not defined.
5.2 Refinamiento y validación de modelos generados	Error! Bookmark not defined.
5.2.1 Evaluación de la calidad estereoquímica de las estructuras	Error! Bookmark not defined.
5.2.2 Evaluación de la calidad energética global	Error! Bookmark not defined.
5.2.3 Evaluación de la relación entre la estructura 3D con la secuencia aminoacídica	Error! Bookmark not defined.
5.3 Efecto de la glicosilación de las proteínas FcXTH1 y FcXTH2	Error! Bookmark not defined.
5.4 Interacción Proteína–Ligando	Error! Bookmark not defined.
5.5 Dinámica molecular de complejos	Error! Bookmark not defined.
5.6 MM-GBSA, evaluación de energía libre de unión	Error! Bookmark not defined.
6. DISCUSIÓN	Error! Bookmark not defined.
7. CONCLUSIÓN	Error! Bookmark not defined.
8. BIBLIOGRAFÍA	Error! Bookmark not defined.
9. ANEXOS	Error! Bookmark not defined.
9.1 Modelamiento comparativo	Error! Bookmark not defined.
9.2 Simulación de Dinámica Molecular	Error! Bookmark not defined.
9.3 Campos de Fuerza	Error! Bookmark not defined.
9.4 Condiciones Periódicas de Borde	Error! Bookmark not defined.
9.5 Ensamble NPT	Error! Bookmark not defined.
9.6 Minimización y Equilibrio Termodinámico	Error! Bookmark not defined.
9.7 Simulación de Acoplamiento Molecular o Docking	Error! Bookmark not defined.
9.8 MM-GBSA	Error! Bookmark not defined.

II. ÍNDICE DE TABLAS

Tabla 1: Unidades de oligosacáridos estructurales de xiloglucano obtenidos a partir de algunas frutas..... **Error! Bookmark not defined.**

Tabla 2: Energías de interacción de FcXTH1 con sus sustratos XXXG y XXFG. **Error! Bookmark not defined.**

Tabla 3: Energías de interacción de FcXTH2 con sus sustratos XXXG y XXFG. **Error! Bookmark not defined.**

Tabla 4: Distancias de residuos estabilizadores de sustratos XXXG y XXFG para FCXTH1 y FcXTH1_9m..... **Error! Bookmark not defined.**

Tabla 5: Distancias de residuos estabilizadores de sustratos XXXG y XXFG para FCXTH2 y FcXTH2_9m..... **Error! Bookmark not defined.**

Tabla 6: Resultados de MM-GBSA calculados para XXXG- y XXFG- en complejo con FcXTH1 y FCXTH1_9m..... **Error! Bookmark not defined.**

Tabla 7: Resultados de MM-GBSA calculados para XXXG- y XXFG- en complejo con FcXTH2 y FCXTH2_9m..... **Error! Bookmark not defined.**

III. ÍNDICE DE FIGURAS

- Figura 1:** Estructura de la pared celular primaria..... **Error! Bookmark not defined.**
- Figura 2:** Microfibrillas de Celulosa **Error! Bookmark not defined.**
- Figura 3:** Estructuras representativas de oligosacáridos derivados de xiloglucano (XGs)..... **Error! Bookmark not defined.**
- Figura 4:** Caracterización estructural de PttXET16-34 y TmNXG1 **Error! Bookmark not defined.**
- Figura 5:** Representación esquemática del mecanismo enzimático de XTH con sustratos de XG..... **Error! Bookmark not defined.**
- Figura 6:** (A) y (B) Nivel de expresión de los genes FcXTH1 y FcXTH2. **Error! Bookmark not defined.**
- Figura 7:** Esquema de interacciones en la hendidura del sitio activo de PttXET16-34 con XXXG..... **Error! Bookmark not defined.**
- Figura 8:** Representación gráfica de los pasos que componen un modelamiento por homología. **Error! Bookmark not defined.**
- Figura 9:** Condiciones periódicas de borde. **Error! Bookmark not defined.**
- Figura 10:** Sistema para Dinámica Molecular..... **Error! Bookmark not defined.**
- Figura 11:** Estructura de glicosilación para XTH, $\text{Man}_{5-9}\text{GlcNAc}_2$. **Error! Bookmark not defined.**
- Figura 12:** Estructura de los ligando..... **Error! Bookmark not defined.**
- Figura 13:** Estrategia para estudio de interacción proteína-ligando **Error! Bookmark not defined.**
- Figura 14:** Estructura de las isorformas FcXTH..... **Error! Bookmark not defined.**
- Figura 15:** Zoom hacia el interior de las moléculas. **Error! Bookmark not defined.**
- Figura 16:** Gráfico de RMSD durante la simulación de dinámica molecular para ambas enzimas XTH..... **Error! Bookmark not defined.**
- Figura 17:** Gráfico de Ramachandran **Error! Bookmark not defined.**
- Figura 18:** Gráfico ProSA **Error! Bookmark not defined.**
- Figura 19:** Gráfico ProSA. **Error! Bookmark not defined.**
- Figura 20:** Gráfico de resultados de Verifi3D..... **Error! Bookmark not defined.**
- Figura 21:** Gráfico de RMSD **Error! Bookmark not defined.**
- Figura 22:** Posicionamiento de sustratos en la cavidad de FcXTH. **Error! Bookmark not defined.**
- Figura 23:** Gráficos de RMSD de la trayectoria para FcXTH1 y FcXTH1-9m **Error! Bookmark not defined.**
- Figura 24:** Gráficos de RMSD de la trayectoria FcXTH2 y FcXTH2-9m. **Error! Bookmark not defined.**
- Figura 25:** Gráficos de RMSD de la trayectoria. a) XXXG y b) XXFG **Error! Bookmark not defined.**

Figura 26: Gráficos de RMSD de la trayectoria. a) XXXG y b) XXFG **Error! Bookmark not defined.**

Figura 27: a) FcXTH1_XXXG, b) FcXTH1_9m_XXFG **Error! Bookmark not defined.**

Figura 28: a) FcXTH2_9m_XXXG, b) FcXTH2_9m_XXFG **Error! Bookmark not defined.**