

Resumen	3
Antecedentes.	3
Introducción.	5
Hipótesis.	9
Material y métodos.	9
1.1. Creación computacional de los ligandos naturales de referencia de la β -lactoglobulina.	9
1.2. Preparación de los receptores para docking, Vina.	9
1.2.1. Preparación de modelos tridimensionales	10
1.2.2. Docking Vina por PyRx	10
1.3. Preparación de los receptores para docking, UCSF Dock.	11
1.3.1. Obtención de modelos tridimensionales	11
1.3.2. Preparación de ligandos	12
1.3.3. Preparación del receptor 1GXA	12
1.3.4. Generación de rejilla sobre el sitio activo y ligando	13
1.3.5. Docking con Dock6 mecánica molecular	13
Resultados y discusión.	14
1.1. Unión computacional usando Vina	14
1.2. Unión computacional usando Dock6, rígido.	16
Unión computacional usando Dock6, anchor_and_grow.	16
Unión computacional usando Dock6, mecánica molecular.	16
Conclusiones	17
Referencias	18
Agradecimientos.	21
Apéndice 1, videos tutoriales:	21