

## Tabla de contenidos

<b>Tabla de contenidos</b>	<b>3</b>
<b>Resumen</b>	<b>4</b>
<b>Abstract</b>	<b>5</b>
<b>Marco Teórico</b>	<b>6</b>
<b>El Trastorno Obsesivo Compulsivo (TOC)</b>	<b>6</b>
<b>Etiología del TOC</b>	<b>7</b>
<b>SERT y EAAT3 como blancos terapéuticos del TOC</b>	<b>10</b>
<b>Estrategia polifarmacológica para el TOC</b>	<b>11</b>
<b>Estructuras de SERT y EAAT3</b>	<b>12</b>
<b>Racionalidad del diseño polifarmacológico en TOC</b>	<b>15</b>
<b>Hipótesis</b>	<b>16</b>
<b>Objetivo General</b>	<b>16</b>
<b>Objetivos específicos</b>	<b>16</b>
<b>Materiales y Métodos</b>	<b>17</b>
<b>Obtención estructuras equilibradas del SERT y EAAT3 humana a través de dinámicas de simulación molecular</b>	<b>17</b>
<b>Determinación del receptor mediante el descubrimiento y la búsqueda de patrones de aminoácidos 3D similares entre las estructuras</b>	<b>19</b>
<b>Construcción de una biblioteca de compuestos mediante un modelo heurístico</b>	<b>22</b>
<b>Selección de los mejores compuestos de interacción significativa en SERT y EAAT3 mediante simulaciones de acoplamiento molecular</b>	<b>24</b>
<b>Resultados y discusión</b>	<b>26</b>
<b>Referencias</b>	<b>45</b>
<b>Anexos</b>	<b>49</b>