

## INDICE

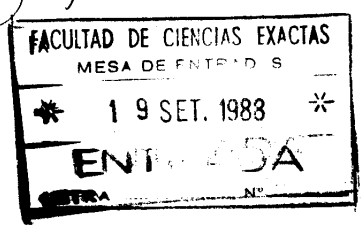
1-Introducción	1
2-Desarrollo histórico del problema	6
a) Descubrimientos biológicos. Teorías celular y genética	6
b) Descubrimientos químicos. Química de los ácidos nucleicos. Tautómeros	7
c) Teorías biofísicas. Fenómeno de las mutaciones. Cáncer y envejecimiento explicados como saltos cuánticos	14
3-Estructura del D.N.A y su importancia como portador del código genético	17
a) Modelo de Watson y Crick	17
b) Complementaridad	19
c) Tautomerismo y mutaciones	21
d) Modelo del R.N.A	24
e) Diferentes tipos de R.N.A y su actuación en la transmisión del código genético	25
f) Teorías acerca de la transmisión del código genético	26
g) Estructura de las proteínas	32
h) Papel del D.N.A y del R.N.A en la síntesis proteínica	36
i) Virus	37
4-Propiedades de las ligaduras hidrógeno	39
a) Formulación electrón-protón	39
b) Teoría cuántica de la ligadura hidrógeno; efecto túnel	46
c) Efecto túnel y su dependencia de la temperatura	55
c <sub>1</sub> ) Efecto túnel a través de un pozo simple	56
c <sub>2</sub> ) Efecto túnel a través de un doble pozo potencial	60
d) Datos acerca del efecto túnel protónico en una ligadura hidrógeno	62

e) Estudio del doble pozo potencial como una superposición de modelos potenciales	68
f) Efecto túnel protónico en el D.N.A	74
f <sub>1</sub> ) Espontáneo	74
f <sub>2</sub> ) Inducido	76
5-Réplica del D.N.A y del R.N.A	79
a) Réplica del D.N.A	79
b) Plano de réplica	84
c) Formación del R.N.A	91
6-El problema de los errores en el código	100
a) Mutaciones	100
a <sub>1</sub> ) Espontáneas	100
a <sub>2</sub> ) Inducidas	103
b) Envejecimiento	105
c) Tumores	107
c <sub>1</sub> ) Espontáneos	108
c <sub>2</sub> ) Inducidos	111
d) Teoría de la evolución	115
7-Estudio físico de las macromoléculas	121
a) Métodos cuánticos en la física molecular	121
b) Método de Hückel	125
c) Extensión del método de Hückel	127
d) Método de Del Re	128
e) Métodos semi-empíricos desarrollados por medios compu- tacionales	130
e <sub>1</sub> ) CNDO/1;CNDO/2	130
e <sub>2</sub> ) CNDO/S (Jaffé)	131
e <sub>3</sub> ) CNDO/M (Jaffé-Del Bene)	132

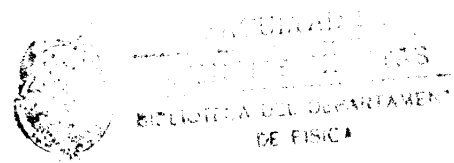
e <sub>4</sub> ) INDO	132
e <sub>5</sub> ) MINDO	133
e <sub>6</sub> ) MNDO	134
f) Métodos "ab-initio"	135
f <sub>1</sub> ) Método STO-NG	136
f <sub>2</sub> ) Métodos "ab-initio" de bases extendidas	137
g) Método MSW-X <sub>a</sub>	138
B-Desarrollo del trabajo	143
a) Estudio de los niveles energéticos correspondientes a formas tautoméricas de la molécula de hipoxantina	143
a <sub>1</sub> ) Mapas isopotenciales correspondientes a esos estados, para formas tautoméricas	143
a <sub>2</sub> ) Interpretación, en base a los resultados obtenidos en a <sub>1</sub> ), de reacciones químicas en que se ven involucrados esos tautómeros	144
b) Estudio de las constantes de equilibrio y tiempo de efecto túnel para la guanina, citosina o hipoxantina	153
b <sub>1</sub> ) Determinación de la probabilidad de formación de tautómeros, por efecto túnel	154
b <sub>2</sub> ) Resultados numéricos y conclusiones	156
c) Estudio de las polarizabilidades	165
c <sub>1</sub> ) Interacción entre radiación y materia. Tensor de polarización	165
c <sub>2</sub> ) Cálculo de polarizabilidades para la molécula de hipoxantina	171
c <sub>3</sub> ) Resultados numéricos y conclusiones	173
Apéndice A	182
a) Programa para el cálculo de $\alpha$ , $\beta$ y $\gamma$	182
b) Método CNDO/M-SCF-CI	192

Apendice B:	193
a) Ligadura hidrógeno	193
b) Teoría de Lewis (del octeto)	195
Bibliografía	198
Indice	202

*Amador*



*Ente en Biblioteca el 19 de Set. 1983*  
*T. 30*



*[Handwritten signature]*