**Trabajo Práctico: Estructura de proteínas**

**RETO I: Estas estructuras difieren de las estructuras sobre las que venimos trabajando en su determinación. Como habrás notado estas fueron obtenidas mediante la técnica de MNR, ¿Pero en qué consiste esta técnica?**

**Te dejamos un video para que indagues más sobre esta técnica y sus aplicaciones:** [**https://www.youtube.com/watch?v=H-SQFSynKOk**](https://www.youtube.com/watch?v=H-SQFSynKOk)

**A las moléculas se les aplican campos magnéticos fuertes y algunos atomos se comportan como imanes. El nucleo empieza a resonar en su propia frecuencia. La altura de cada pico representa la cantidad de atomos que resuenan en la misma frecuencia, llamado intensidad de señal. Esto nos da información sobre el entorno del atomo en cuestión, sus atomos vecinos y su posición relativa.**

**RETO II: Investigá en qué consisten las interacciones puentes de hidrógeno, π-π y π-catión y qué aminoácidos podrían intervenir en dichas interacciones.**

**La interacción catión-π es una interacción molecular no covalente entre la cara de un sistema pi rico en electrones (vg. benceno, etileno) con un catión adyacente (vg. Li+, Na+). Esta interacción inusual es un ejemplo de enlace no covalente entre un monopolo (catión) y un cuadrupolo (sistema π). La energía de la interacción catión-π es del mismo orden de magnitud del enlace de hidrógeno o del puente salino, y juega un rol importante en el reconocimiento molecular.1**

**RETO III: Investigá en qué consiste el docking, en qué ideas basa su funcionamiento.**

**Acoplamiento molecular** o **Docking** (del inglés, anclarse). En el campo del [Modelado molecular](https://es.wikipedia.org/wiki/Modelado_molecular), este es un método que predice la conformación preferida de una molécula, al estar unida a otra, con el fin de formar un complejo estable.[1](https://es.wikipedia.org/wiki/Acoplamiento_molecular#cite_note-1)​ El conocimiento de la orientación preferida a su vez puede ser usada para predecir la fuerza de la asociación o la afinidad de enlace entre dos moléculas, usando por ejemplo, las funciones de puntuación (o funciones de scoring)

La asociación entre moléculas biológicamente relevantes, tales como [proteínas](https://es.wikipedia.org/wiki/Prote%C3%ADna), [ácidos nucleicos](https://es.wikipedia.org/wiki/%C3%81cido_nucleico), [carbohidratos](https://es.wikipedia.org/wiki/Carbohidratos) y [lípidos](https://es.wikipedia.org/wiki/L%C3%ADpido) juega un papel central en la [transducción de señal](https://es.wikipedia.org/wiki/Transducci%C3%B3n_de_se%C3%B1al). Por tanto, la orientación relativa del dúo interactuante puede afectar el tipo de señal producida (ejemplo, [agonismos](https://es.wikipedia.org/wiki/Agonista) contra antagonismo). Por lo que el acoplamiento molecular gana importancia al predecir la fuerza y el tipo de señal producida.

El acoplamiento molecular es usado para predecir la orientación del enlace de una molécula pequeña, que serán candidatos a fármacos, con la proteína que será donde ejercerán su acción, con lo que se podrá predecir la afinidad y la actividad de la molécula pequeña. Y es por eso que este método tiene un rol muy importante en el diseño racional de fármacos.[2](https://es.wikipedia.org/wiki/Acoplamiento_molecular#cite_note-2)​ Dada la importancia biológica y farmacéutica, se han hecho grandes esfuerzos buscando mejorar el método usado para predecir el acoplamiento molecular