Instituto Politécnico Nacional
Escuela Superior de Cómputo
Bioinformatics
Introducción a la Dinámica Molecular
Tinoco Videgaray Sergio Ernesto
Rosas Trigueros Jorge Luis
15/05/2024
15/05/2024

Marco teórico.

UniProt significa "Universal Protein Resource" y es, como su nombre lo indica, un recurso central y gratuito de información sobre proteínas. Se ha convertido en la base de datos de proteínas más importante del mundo. UniProt colabora con el Instituto Europeo de Bioinformática (EMBL-EBI), el Instituto Suizo de Bioinformática SIB y el Protein Information Resource (PIR). En los tres institutos, más de 100 personas participan en diferentes tareas, como curación de bases de datos, desarrollo de software y soporte. [1]

En UniProt se encontrará información sobre:

- La secuencia de aminoácidos de la proteína, que son los bloques de construcción básicos de las proteínas.
- La función de la proteína, o qué hace en el cuerpo.
- La estructura de la proteína, o su forma tridimensional.
- Cualquier modificación que pueda tener la proteína.

La información de UniProt proviene de dos fuentes principales:

- Proyectos de secuenciación del genoma, que determinan el orden de los nucleótidos en el ADN de un organismo.
- Publicaciones en revistas científicas, donde los investigadores describen sus descubrimientos sobre proteínas específicas.

Material y equipo.

Para esta práctica se utilizaron los siguientes materiales y recursos:

- Un equipo con acceso a internet.
- La plataforma UniProt.

Desarrollo.

Recopilación de secuencias de HBA1 de al menos 50 especies diferentes.
 En este paso se seleccionaron y añadieron 50 secuencias de la proteína HBA1 a la canasta de UniProt (Figura 1-7).



Figura 1. Búsqueda de secuencias de HBA1.

■ Entry ▲		Entry Name 🛦	Protein Names 🛦	Gene Names 🛦	Organism 🛦	Length
□ A0A2J8IND9	h	A0A2J8IND9_PANTR	HBA1 isoform 3[]	CK820_G0054685, CK820_G0054686	Pan troglodytes (Chimpanzee)	110 AA
✓ A0A2J8INE6 🏠	li li	A0A2J8INE6_PANTR	HBA1 isoform 1[]	CK820_G0054685, CK820_G0054686	Pan troglodytes (Chimpanzee)	142 AA
□ 0 02777	a	CNR1_FELCA	Cannabinoid receptor 1 []	CNR1	Felis catus (Cat) (Felis silvestris catus)	472 AA
☑ Q5IS73 奋	ā	CNR1_PANTR	Cannabinoid receptor 1	CNR1	Pan troglodytes (Chimpanzee)	472 AA
□ Q71SP5	ā	CNR1_MACMU	Cannabinoid receptor 1	CNR1	Macaca mulatta (Rhesus macaque)	472 AA
□ Q9PUI7	8	CNR1_TARGR	Cannabinoid receptor 1	CNR1	Taricha granulosa (Roughskin newt)	473 AA

Figura 2. Selección de las primeras secuencias de HBA1.

	Entry A		Entry Name 🛦	Protein Names 🛦	Gene Names 🛦	Organism A	Length .
	A0A8V0ZAH8	h	A0A8V0ZAH8_CHICK	Hemoglobin subunit alpha-A[]	HBA1	Gallus gallus (Chicken)	168 AA
	A0A8V0ZB98	h	A0A8V0ZB98_CHICK	Hemoglobin subunit alpha-A[]	HBA1	Gallus gallus (Chicken)	203 AA
2	A9L8T9 🔠	lì	A9L8T9_PAPAN	Hemoglobin, alpha 1 (Predicted)	HBA1	Papio anubis (Olive baboon)	142 AA
0	C1BG68	h	C1BG68_ONCMY	Hemoglobin subunit alpha-1	HBA1	Oncorhynchus mykiss (Rainbow trout) (Salmo gairdneri)	143 AA
2	C1BGX1 🚳	lì	C1BGX1_ONCMY	Hemoglobin subunit alpha-1	HBA1	Oncorhynchus mykiss (Rainbow trout) (Salmo gairdneri)	95 AA
0	C1BIB0	li .	C1BIB0_ONCMY	Hemoglobin subunit alpha-1	HBA1	Oncorhynchus mykiss (Rainbow trout) (Salmo gairdneri)	143 AA
	C3KID2	lì	C3KID2_ANOFI	Hemoglobin subunit alpha-1	HBA1	Anoplopoma fimbria (Sablefish)	143 AA
_							

Figura 3. Selección de mas secuencias de HBA1.



Figura 4. Selección de las ultimas secuencias de HBA1.

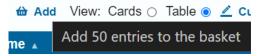


Figura 5. Adición de las 50 secuencias a la canasta de UniProt.

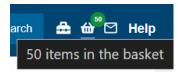


Figura 6. Cantidad de secuencias dentro de la canasta una vez fueron agregadas.

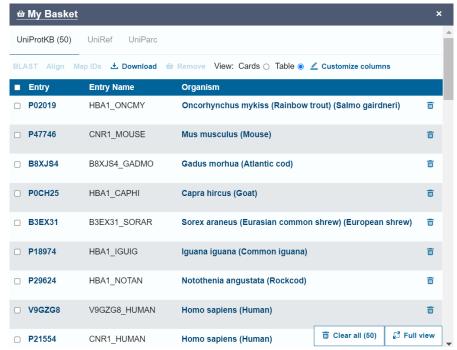


Figura 7. Visualización de la canasta de UniProt.

2. Alineamiento de Secuencias.

En esta sección se seleccionaron las 50 secuencias dentro de la canasta y se aplicó la función de alineamiento proporcionada por UniProt (Figura 8-10).

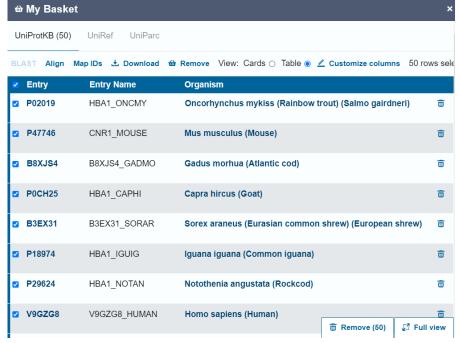


Figura 8. Selección de las 50 secuencias dentro de la canasta de UniProt.



Figura 9. Ventana de la función del alineamiento de secuencias.



Figura 10. Vista de la alineación en proceso.

Una vez se realizó el alineamiento de las secuencias de las 50 especies se muestra una matriz con las secuencias resaltando los aminoácidos que se logran alinear de forma vertical, añadiendo algunos guiones para favorecer el alineamiento (Figura 11 y 12).

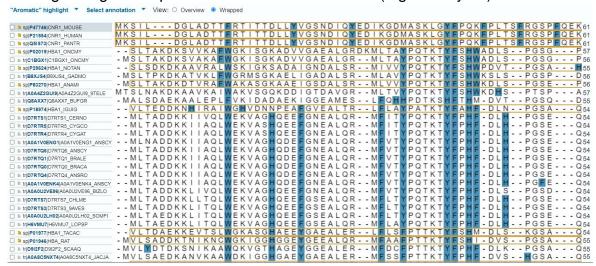


Figura 11. Matriz de alineamiento de secuencias aromáticas.

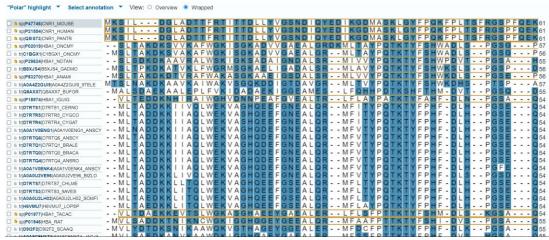


Figura 12. Matriz de alineamiento de secuencias polares.

De igual forma, se obtuvo el árbol de secuencias después de aplicar el alineamiento en el cual se muestra la similitud entre las distintas especies y el ancestro que comparten como se muestra en la figura 13.

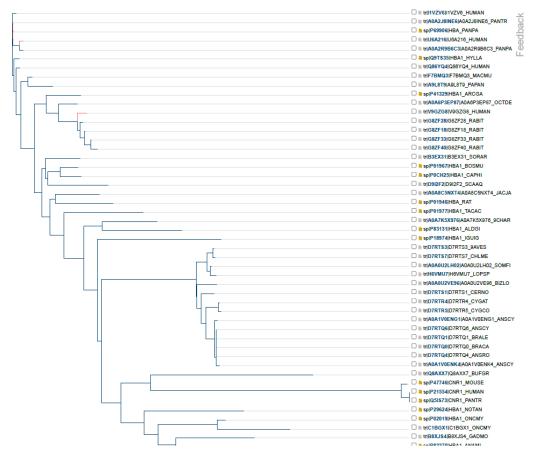


Figura 13. Árbol de secuencias de las 50 especies.

Por ultimo se visualizo la matriz de similitud entre las secuencias obtenidas (figura 14).

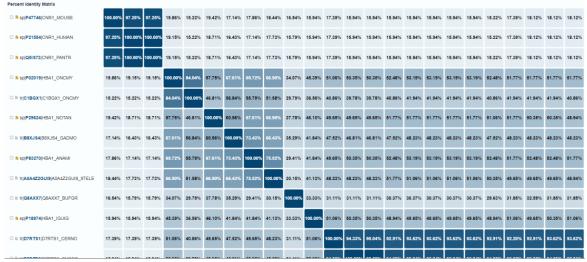


Figura 14. Matriz de similitud entre las especies.

3. "BLAST" usando la entrada P01979.

Dentro de UniProt se ejecutó la función "BLAST" utilizando como entrada el ID P01979 el cual corresponde a la especie "Ornitorrinco" como se aprecia en la figura 15 y 16.

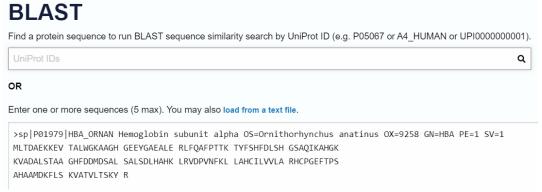


Figura 15. Ventana de la función BLAST con la entrada P01979.

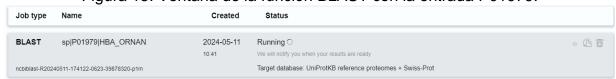


Figura 16. Ejecución del "BLAST" con la secuencia P01979.

Posteriormente se visualiza la similitud entre la secuencia con las mas parecidas a la misma (Figura 17).

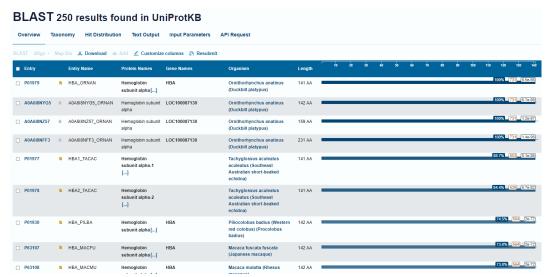


Figura 17. Similitud de la entrada P01979 con otras secuencias.

Como se pudo apreciar en la figura 17 la secuencia de un Ornitorrinco es mas similar a la de un Echidna tipo Tachyglossidae en un 88.7%.

4. Obtención de una secuencia de proteínas no caracterizada de un organismo desconocido e investigación de esta.

Proteína: Cisteína/Cisteína ácido sulfínico descarboxilasa.

Secuencia:

>sp|A0A2I9|CCSD_UNKP Cysteine/Cysteine sulfinic acid decarboxylase OS=Unknown prokaryotic organism OX=2725 GN=undec1A PE=1 SV=1

MITPLTLATLSKNPILVDFFDPEDGRWNSHVDLGLWSDLYLIAPATANTIGKMAAGIADN LLLTSYLSARCPVFIAPAMDVDMLMHPATQRNLGILKSSGNHIIEPGSGELASGLTGKGR MAEPEEIVREVISFFSKKKITEKPLNGRRVFINAGPTIEPIDPVRFISNYSSGRMGIALA DAAAAMGAEVTLVLGPVTLRPSSQDINVIDVRSAAEMKEASVEAFRECDIAILAAAVADF TPLTTSDKKIKRGSGEMVINLRPTEDIAAELGKMKKKNQLLVGFALETDDEITNASSKLK RKNLDMIVLNSLKDPGAGFGHETNRITIIDKSNNIDKFELKTKGEVAADIIRKILTLVH

Función:

Cataliza la descarboxilación de L-cisteína a cisteamina y de 3-sulfino-L-alanina (ácido cisteína sulfínico) a hipotaurina (Figura 18).

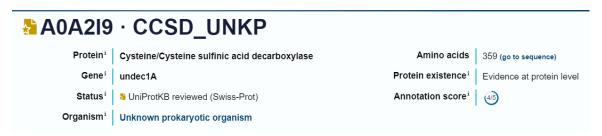


Figura 18. Información de la proteína A0A2I9.

Se aplicó un BLAST con la entrada A0A2I9 y se observo una semejanza del 65.7% con una "Sanguibacteroides justesenii" la cual es una bacteria recientemente descubierta que se ha aislado de hemocultivos en una prueba de laboratorio para detectar bacterias en el torrente sanguíneo. No se sabe mucho sobre esta bacteria, pero se considera un agente del grupo de riesgo 2. Esto significa que se cree que tiene un riesgo moderado de causar enfermedades en humanos y animales. Se necesitan más investigaciones para comprender mejor Sanguibacteroides justesenii, incluido su potencial en la causa de enfermedades y cómo se propaga (Figura 19). [2].



Figura 19. Vista de la similitud de la proteína A0A2I9.

Conclusiones y recomendaciones.

UniProt al igual que PDB es una plataforma para el estudio y la visualización de proteínas y secuencias de aminoácidos que implementa algunas herramientas para el alineamiento de secuencias y la similitud entre las mismas.

Conocer estas herramientas en crucial para el estudio y la comprensión de las proteínas tanto las que ya se han estudiado profundamente como las que aún no se estudian en su totalidad y gracias a UniProt, los científicos de todo el mundo tienen acceso a un entorno para acceder a información completa y confiable sobre las proteínas lo cual es fundamental para la investigación en biología molecular, genética, medicina y muchos otros campos.

Referencias.

[1] UniProt: the universal protein knowledgebase in 2021:

https://academic.oup.com/nar/article/45/D1/D158/2605721

[2] Sydenham, TV, Hasman, H, & Justesen, US. (2015). Draft Genome Sequences of Sanguibacteroides justesenii, gen. nov., sp. nov., Strains OUH 308042T (= ATCC BAA-2681T) and OUH 334697 (= ATCC BAA-2682), Isolated from Blood Cultures from Two Different Patients. Genome Announc, 3(1), e00005-15.

https://www.ncbi.nlm.nih.gov/Taxonomy/Browser/wwwtax.cgi?id=1547597