

# **BIOINFORMÁTICA**

**TP CAVIDADES**

**ENRIQUE ALONSO**

**DESAFÍO I: Compará el sitio activo de ambos confórmers (posición 837) así como también los tamaños de los pockets. ¿Qué observás?**

Para el 1m14 se observa que la posición 837 forma parte de la cavidad 3 y esta tiene un tamaño de pocket de 1.22E-01

Para la estructura 3W32 se visualiza que la posición 837 forma parte de la cavidad 7 y esta última tiene un valor de pocket de 8.80E-02.

Aparentemente la primera tiene un valor más grande que la segunda, aunque la herramienta no muestra una escala para poder determinarlo

**DESAFÍO II: Las variantes de AKR1C4 están asociadas con el trastorno bipolar y otros trastornos del estado de ánimo y la resistencia a los medicamentos. Investigá la proteína usando la base de datos Uniprot y anotá los sitios relevantes biológicamente.**

Consultando el sitio <https://www.uniprot.org/uniprotkb/P17516/entry> se observan muchas variantes sobre esta proteína. Por ejemplo, solo por mencionar, hay 4 variantes para humanos y 2 para chimpances y en general esta compuesta por 323 aminoácidos.

El sitio activo parece darse en la Tirosina (Y) de posición 55. Este sitio activo forma parte de 2 cavidades y una de ellas cuales es drogable.

**DESAFÍO III :Analizá la estructura PDB 2FVLB) ¿Cuántas cavidades fueron predichas para dicha estructura? ¿Hay alguna cavidad drogable? ¿Coincide con algún sitio de relevancia biológica?**

CAVIDB predice 17 cavidades de las cuales solo la cavidad 1 es drogable.  
La cavidad Nro 1 coincide con un sitio de actividad en la posición 55.

**DESAFÍO IV: Investigá en CaviDB la las características estructurales de la Albúmina Humana sobre la estructura 1AO6A:**

- ¿Cuántas cavidades fueron predichas para dicha estructura? ¿Cuáles son las principales cavidades en tanto a tamaño de la proteína? ¿Existen cavidades que se solapan con los residuos descritos como relevantes para la actividad enzimática de la albúmina?
- ¿Alguna de las cavidades catalíticamente activas se encuentran activadas? ¿Qué rangos de pKa se observan en dichas cavidades?

Para la estructura 1A06A fueron predichas 24 cavidades. de las cuales 2 son drogables.

En cuanto a tamaño relativo, de mayor a menor, se ordenan así: 1, 26, 23, 15, 2, 25, 3, 16, 7, 9.

Las cavidades solapadas con residuos son:

- Lisina 199 con cavidad 1
- Arg 410 con cavidades 2 y 4
- Tyr 411 con cavidad 2
- Cys 34 no se solapa con ninguna cavidad
- Lys 195 con cavidad 1

**DESAFÍO V: Se sabe que en la albúmina bovina el sitio activo se encuentra corrido respecto del humano, aunque también involucra un aminoácido cargado (Lys 221). Investiga en CaviDB las características estructurales de la estructura de albúmina bovina 4JK4A y compará las características de su sitio activo con las características del sitio activo de la albúmina humana (Lys 199)**

Para la albúmina bovina el sitio activo en el aminoácido cargado (Lisina en la posición 221) se comparte entre las cavidades 5 y 14. Ambas cavidades no son drogables.

Para la albúmina humana el sitio activo en la Lisina con posición 199 concuerda con la cavidad 1, la cual es drogable.