

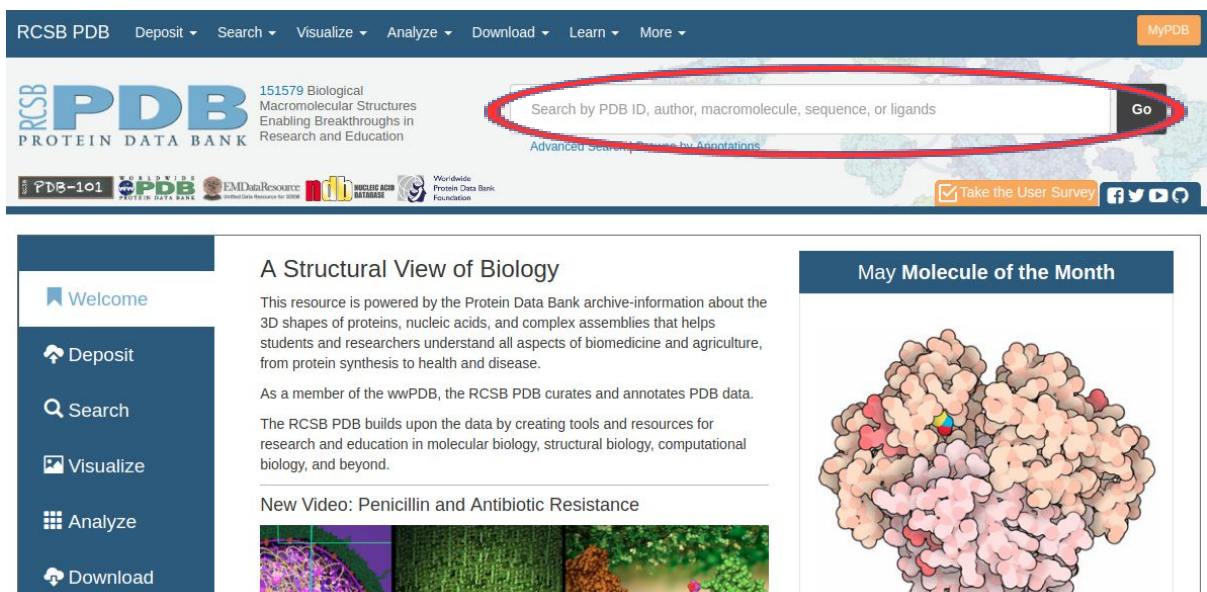
La vida en tres dimensiones

Un gran número de proteínas requieren una determinada estructura terciaria (como llamamos a su estructura tridimensional) para cumplir con sus funciones biológicas. Por ejemplo, la ubiquitina (**ubiquitin** en inglés) es una proteína pequeña que ha sido encontrada en casi todas las células eucariotas (de allí viene su nombre: *ubiquo* significa omnipresente). Esta proteína es la encargada de la marcación química de las proteínas que ya no son necesarias, para que sean reconocidas y destruidas por otras proteínas.

- ¿Por qué una célula querría destruir sus propias proteínas?

Descubramos un poco más acerca de la estructura terciaria de la ubiquitina. Para esto ingresemos al sitio web del Banco de Datos de Proteínas (**Protein Data Bank**, o **PDB**) (<https://www.rcsb.org/>). Esta página web corresponde a una de las bases de datos más utilizadas en la bioinformática, donde se encuentran almacenadas todas las estructuras de macromoléculas biológicas obtenidas hasta el momento. Las estructuras se almacenan en forma de archivos que contienen las coordenadas en el espacio, en ejes imaginarios X, Z e Y, de todos los átomos de una molécula dada. Estas coordenadas pueden ser interpretadas por algunos programas gráficos para mostrar de forma tridimensional cómo se vería, por ejemplo, una proteína en una célula o en una membrana.

- En el cuadro de búsqueda de la PDB, ingresemos el código identificador de la ubiquitina humana: **1UBQ**.



The screenshot shows the RCSB PDB homepage. At the top, there is a navigation bar with links: Deposit, Search, Visualize, Analyze, Download, Learn, and More. A 'MyPDB' button is on the right. Below the navigation bar, the PDB logo is displayed, along with the text '151579 Biological Macromolecular Structures Enabling Breakthroughs in Research and Education'. A search bar is prominently featured, with the placeholder text 'Search by PDB ID, author, macromolecule, sequence, or ligands' and a 'Go' button. Below the search bar, there are links for 'Advanced Search' and 'Search by Annotations'. The main content area is divided into three sections: 'Welcome' on the left, 'A Structural View of Biology' in the center, and 'May Molecule of the Month' on the right. The 'Welcome' section includes a sidebar with links: Deposit, Search, Visualize, Analyze, and Download. The 'A Structural View of Biology' section contains text about the PDB's mission and a video titled 'New Video: Penicillin and Antibiotic Resistance'. The 'May Molecule of the Month' section features a 3D molecular model of a protein structure.

La página correspondiente a la 1UBQ contiene toda la información disponible sobre el experimento en el que se determinó la estructura terciaria de la ubiquitina humana. Incluye información adicional sobre la proteína extraída de otras bases de datos, que permiten conocer más sobre su secuencia, otras proteínas similares, etc.

La primera pantalla que vemos es un resumen de la información estructural (**Structure Summary**).

- ¿Qué información nos provee esta página?
- ¿Cómo se determinó la estructura de esta proteína?
- A la izquierda vemos una representación de la estructura de ubiquitina. ¿Qué significan las cintas, las flechas y las regiones angostas?
- **¿Representa esa imagen a la realidad del sistema biológico?**
- **La estructura 1UBQ fue “refinada a una resolución de 1.8 Angstroms”. Éste es el error asociado al experimento: mientras mayor es la resolución, menor es la certeza al determinar la posición de cada átomo. ¿Cuál es la utilidad y los condicionamientos de usar un modelo científico que sabemos inexacto?**

The screenshot displays the PDB 1UBQ Structure Summary page. The top navigation bar includes the PDB logo and search options. The main content area shows the 3D ribbon structure of Ubiquitin (1UBQ) with a color gradient from blue to red. The right sidebar contains a 'Structure View' panel with various controls: Assembly (Bioassembly 1), Model (Model 1), Symmetry (None), Style (Cartoon), Color (Rainbow), Ligand (Ball & Stick), Quality (Automatic), Water (unchecked), Ions (checked), Hydrogens (checked), and Clashes (unchecked). The bottom of the page features a toolbar with buttons for Spin, Center, Fullscreen, Screenshot, Perspective Camera, White background, and a Focus slider.

Exploremos la pestaña de visualización tridimensional (**3D View**). Con el *mouse* podemos rotar, acercar y desplazar a la molécula. El menú de la derecha nos permite cambiar el modo de representación.

- En la pantalla principal vemos una representación de la estructura de ubiquitina. ¿Qué significan las cintas, las flechas y las regiones angostas?
- **¿Qué diferencias y similitudes notamos respecto de la representación inicial?**
- En el menú de la izquierda hay opciones de distintos tipos de representación y formas de colorear la estructura tridimensional. ¿Para qué podría ser útil visualizar lo mismo de distintas maneras?

Volviendo a la página principal de la estructura, podemos usar el menú derecho para descargar un archivo (**Download files**) con las coordenadas espaciales de cada átomo de esta proteína. En el pequeño menú que se despliegue, elegiremos descargar la estructura de la proteína en formato PDB (**PDB format**), el estándar para estructuras de biomoléculas.

Structure Summary | 3D View | Annotations | Sequence | Sequence Similarity | Structure Similarity | Experiment

Biological Assembly 1 ?

1UBQ

STRUCTURE OF UBIQUITIN REFINED AT 1.8 ANGSTROM

DOI: [10.2210/pdb1UBQ/pdb](https://doi.org/10.2210/pdb1UBQ/pdb) BMRB: 5387

Classification: [CHROMOSOMAL PROTEIN](#)

Organism(s): [Homo sapiens](#)

Deposited: 1987-01-02 Released: 1987-04-16

Deposition Author(s): [Vijay-Kumar, S.](#), [Bugg, C.E.](#), [Cook, W.J.](#)

Experimental Data Snapshot

Method: X-RAY DIFFRACTION

Resolution: 1.8 Å

wwPDB Validation

Metric	Value
Clashscore	1.8
Ramachandran outliers	0.0
Sidechain outliers	0.0
RSRZ outliers	0.0

This is version 1.2 of the entry. See complete [history](#).

3D View: [Structure](#) | [Electron Density](#)

Standalone Viewers
[Protein Workshop](#) | [Ligand Explorer](#)

Display Files | Download Files

- FASTA Sequence
- PDB Format**
- PDB Format (gz)
- PDBx/mmCIF Format
- PDBx/mmCIF Format (gz)
- PDBML/XML Format (gz)
- Biological Assembly 1
- Structure Factors (CIF)
- Structure Factors (CIF - gz)
- 2fo-fc Map (DSN6)
- fo-fc Map (DSN6)
- Map Coefficients (MTZ format)

- ¿Qué información esperarías encontrar como resultado un experimento destinado a determinar la estructura terciaria de una molécula biológica?
- Podemos explorar el contenido del archivo que acabamos de descargar si lo observamos con un editor de texto. Haciendo clic con el botón derecho del mouse sobre el archivo descargado, usemos la opción *Abrir con* y seleccionemos el *Bloc de Notas* u otro editor de texto. ¿En qué consiste un archivo PDB?
- Desplacémonos por el archivo hasta encontrar las líneas que comienzan con la palabra ATOM. ¿Qué tipo de información brinda esta sección?
- ¿Considera que el formato PDB es útil para presentar los resultados del experimento?
- Observamos que la información respeta cierta estructura interna. ¿Cuáles son los beneficios y las limitaciones de imponer una estructura para comunicar los resultados de un experimento?
- Hemos visto que las proteínas tienen estructura tridimensional y hemos podido observar algunas características de las mismas. ¿Será igual con los ácidos nucleicos?
- Rosalind Franklin es una científica muy relevante, que tuvo menos reconocimiento del merecido. ¿Cuáles fueron sus contribuciones en este campo? ¿Qué nos cuenta su historia acerca del mundo de la ciencia?

Por supuesto, es difícil entender en qué consiste la estructura de una molécula simplemente mirando el contenido de un archivo PDB. Ya sabemos que existen

formas de representar la información tridimensional en la computadora. Existen una multiplicidad de aplicaciones gratuitas que nos permita visualizar la estructura de una proteína.

Te proponemos algunas aplicaciones para teléfonos celulares disponibles en las tiendas de nuestro teléfono (NDKmol - molecular viewer o RSCB PDB mobile) de sencilla instalación.