

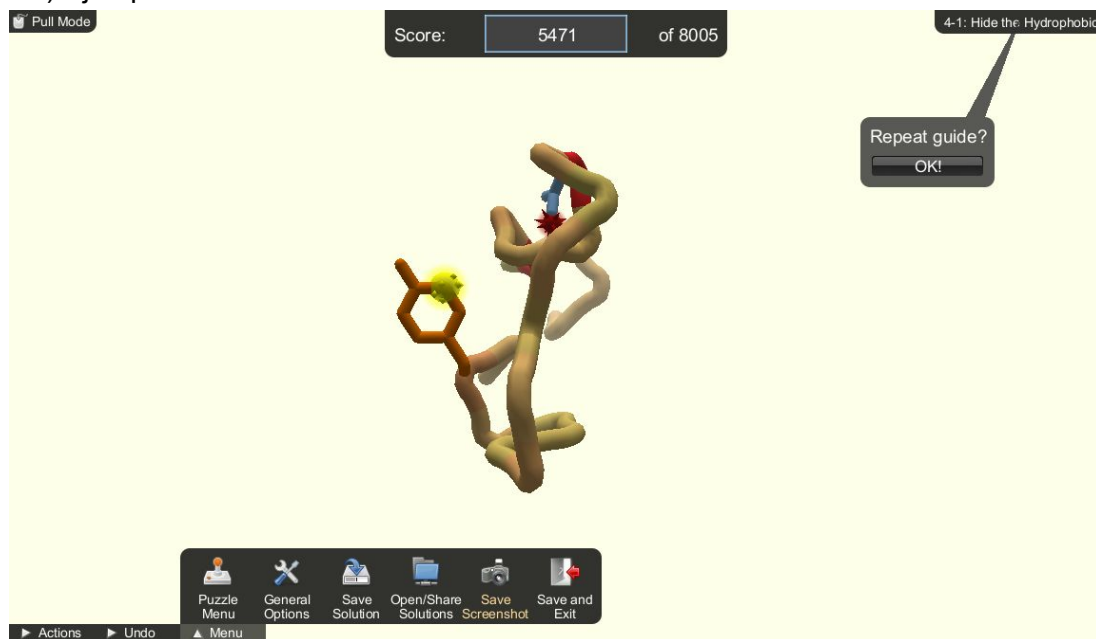
LA ESTRUCTURA DE LAS PROTEÍNAS

1) Creen un repositorio git en tepeu, por ejemplo en su *home/algoritmos_3D*, para ir añadiendo ahí las tareas de los 4 días y sus respectivos informes.

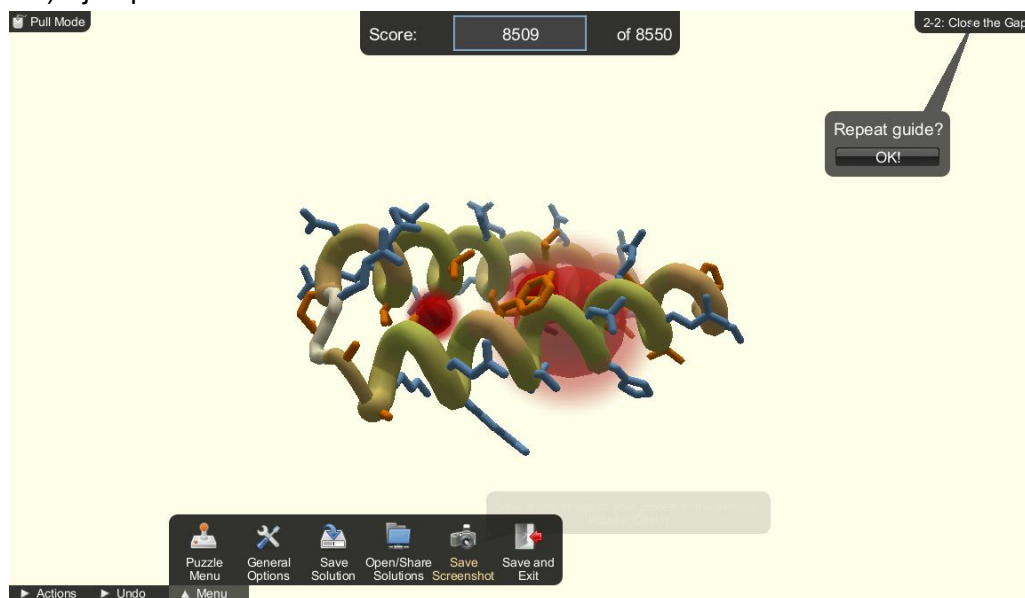
Enlace:

2) Que completen los puzzles de Foldit al menos hasta el nivel 4-5, y por el camino vayan tomando capturas de pantalla que reflejen algunos de los conceptos teóricos que hablamos por la mañana:

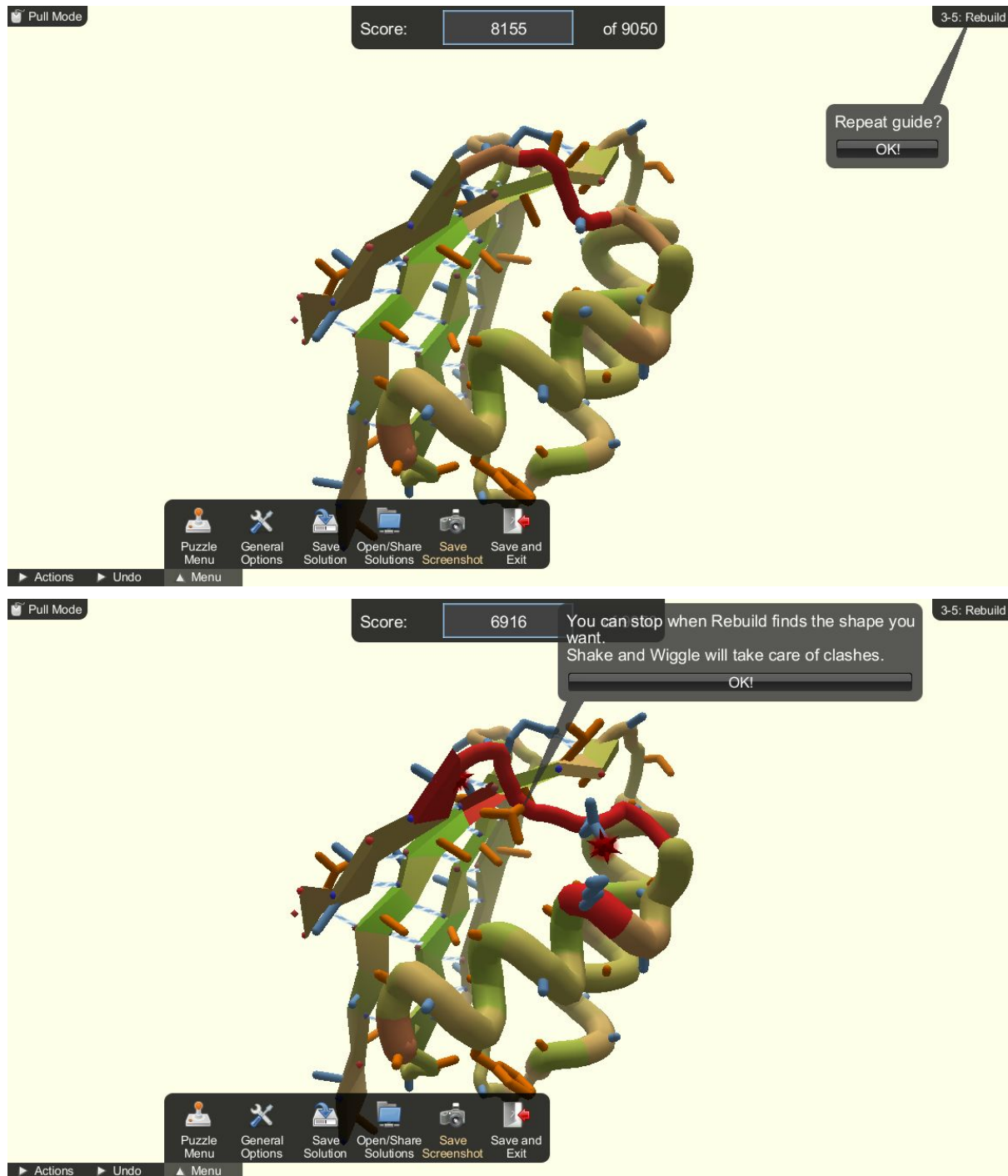
2.1) Ejemplo de aminoácido con cadena lateral aromática



2.2) Ejemplo de aminoácido con cadena lateral chica

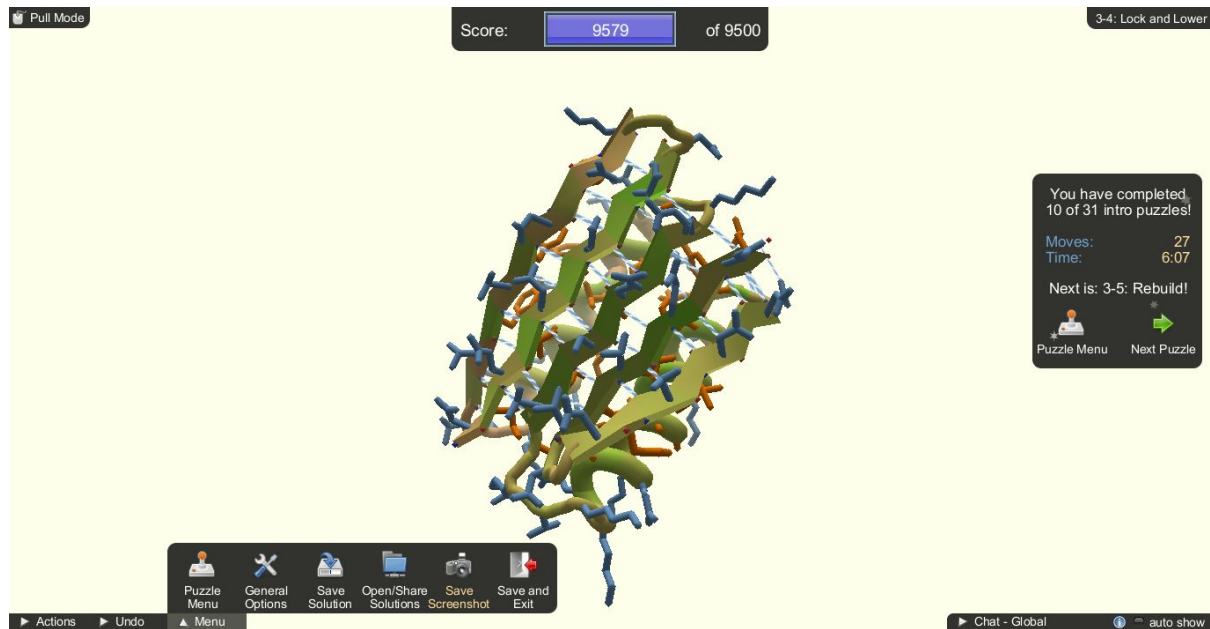


2.3) Ejemplo de giro en torno a los ángulos phi/psi de un residuo seleccionado, que pasa cuando si sus vecinos tienen cadenas laterales voluminosas?



Cuando los vecinos tienen cadenas laterales voluminosas se restringe mucho la movilidad de los ángulos ϕ/ψ . Las imágenes muestran giros en los ángulos (zonas rojas) y se puede ver cómo este cambio genera interacciones no permitidas con una alfa hélice adyacente.

2.4) Ejemplo de puentes de hidrógeno entre residuos de una alfa-hélice y entre hojas de una lámina beta.

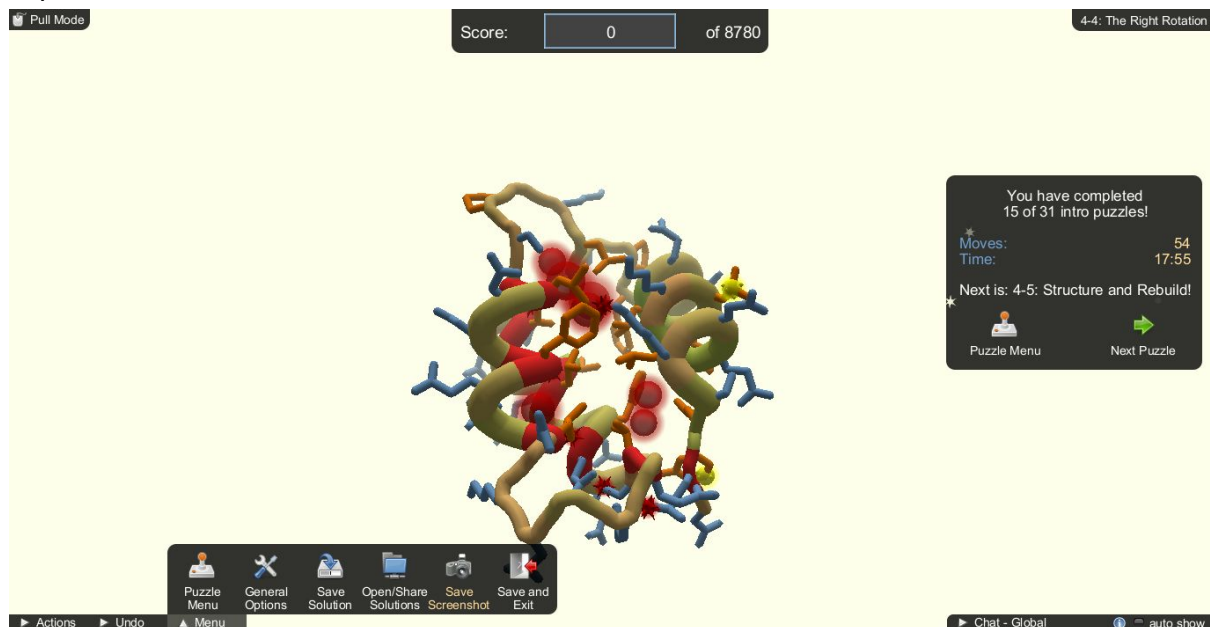


Desde el punto de vista algorítmico, ¿cuál de los estados de estructura secundaria les parece más difícil de programar?

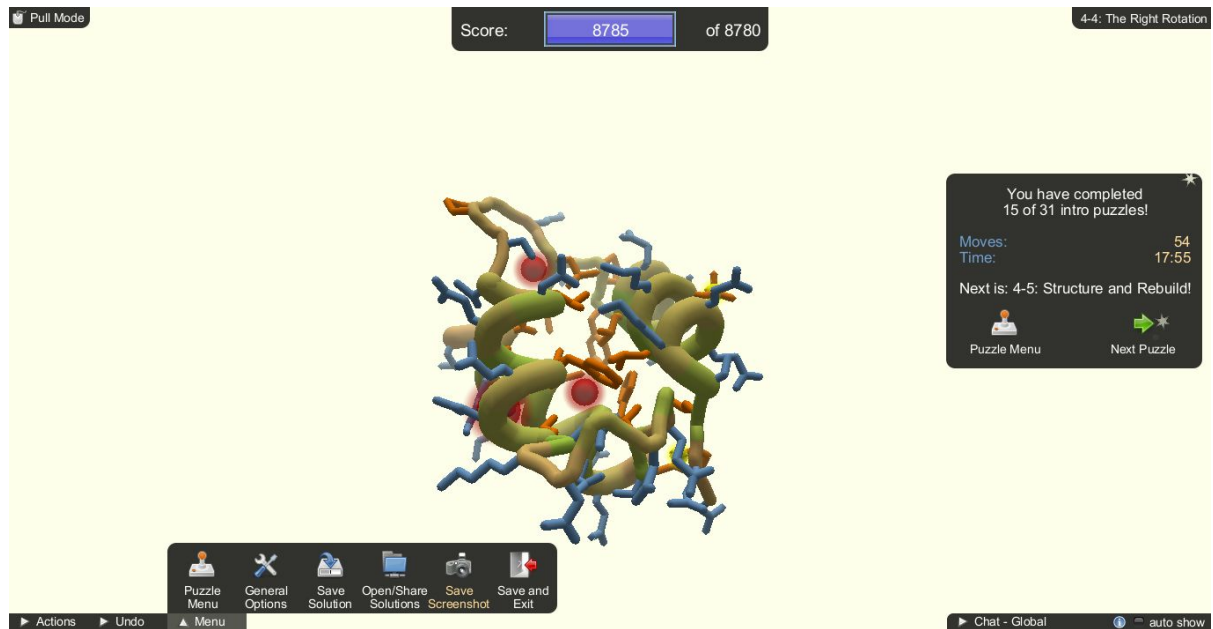
Las láminas β nos parecen más difíciles de programar debido a que tienes que considerar las interacciones mediante puentes de hidrógeno entre cada lámina, si es el caso en que interactúan varias, mientras que las hélices α tienen menos de estos enlaces y no suelen haber entre varias de estas estructuras. Además...

2.5) Ejemplo de residuo hidrofóbico expuesto y luego correctamente "enterrado" tras operaciones con los vecinos.

Expuesto:

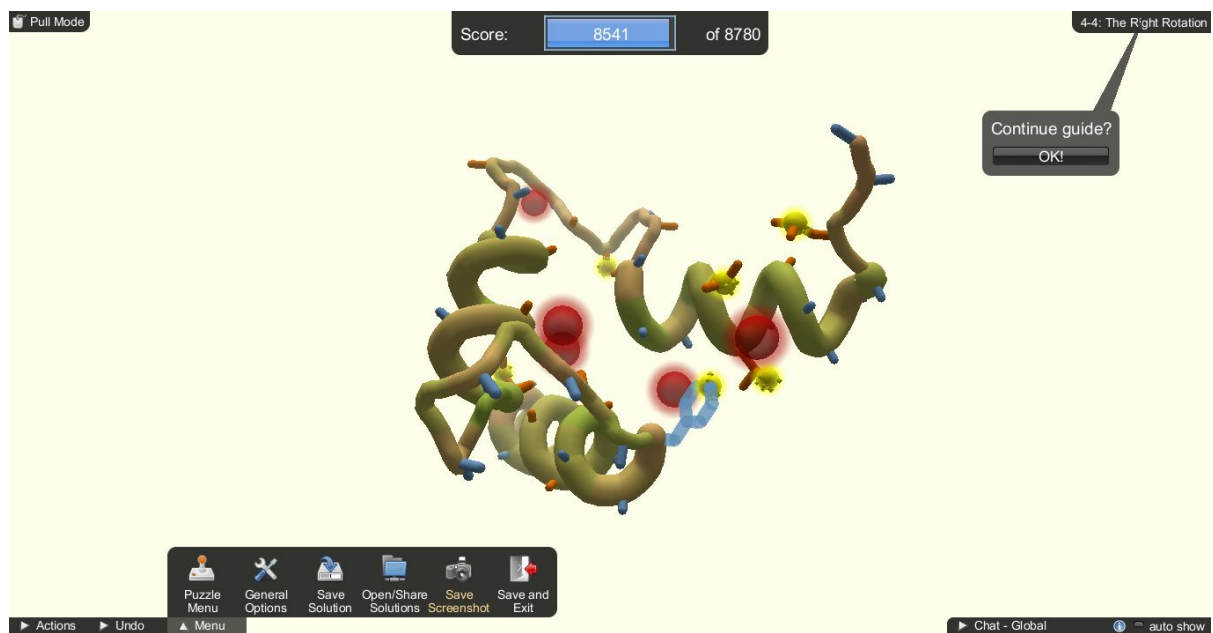


“Enterrado”:



2.6) Ejemplo de conformaciones distintas con puntuaciones similares, para hacer patente el problema de evaluar lo correcto de una conformación.

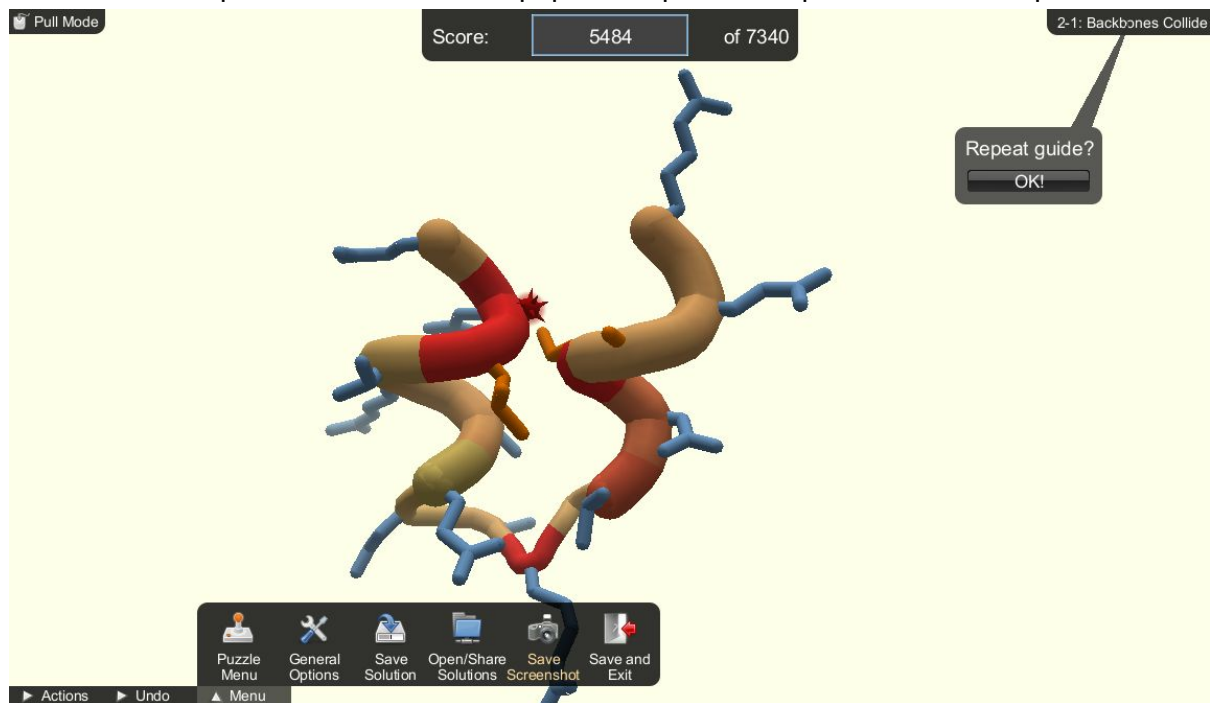
Obsérvese que es la misma proteína “4-4 y que la diferencia en score es de apenas tres unidades. Primero una forma “cerrada”:



Ahora una forma abierta:



2.7) De acuerdo con <http://goo.gl/G8ChC2> calcula el tiempo que llevaría explorar todas las conformaciones posibles de uno de los péptidos o proteínas que utilicen en los puzzles.



Tamaño del péptido: 16 aminoácidos

Tiempo de cambio= 10^{-13} s

Estados diferentes: 10 (por ejemplo)

Tiempo estimado= $10^{16} * 10^{-13} = 10^3$ s para analizar todas las posibles estructuras de esta proteína. Es un péptido muy pequeño y sólo son 1000 segundos pero no se compara en

nada con los 5 seg que tarda *E. coli* en plegar una proteína (en este caso incluso sea menor).