

La estructura de las proteínas

Ciro Ramírez Suástegui, José Damián Martínez Reyes

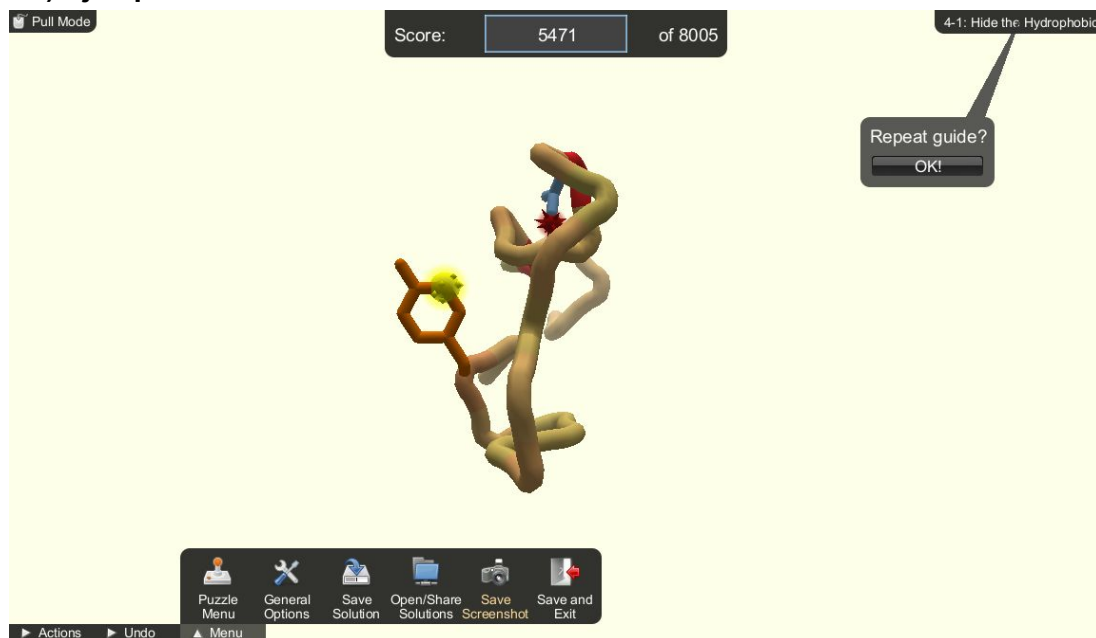
05/03/2016

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.

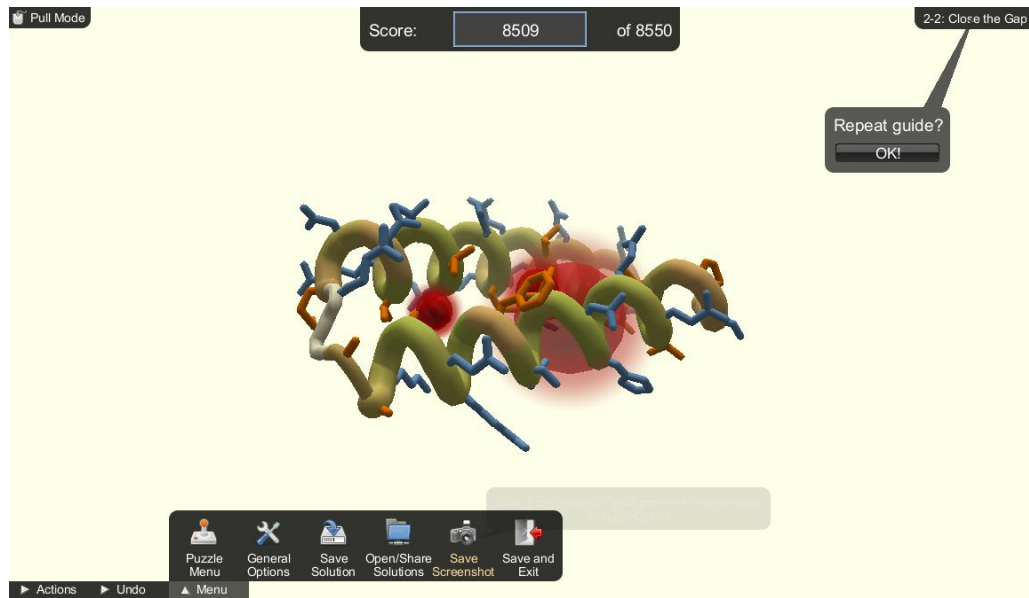
Enlace: <https://github.com/cramirezs/homework>

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:

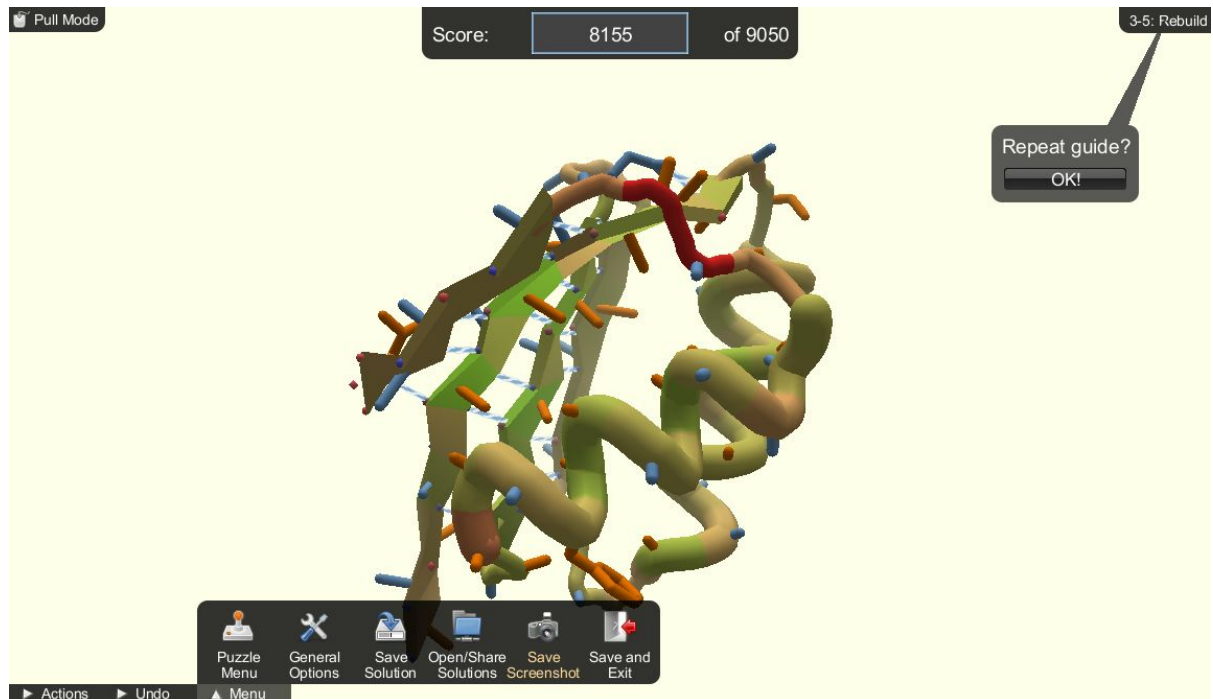
2.1) Ejemplo de aminoácido con cadena lateral aromática



2.2) Ejemplo de aminoácido con cadena lateral chica



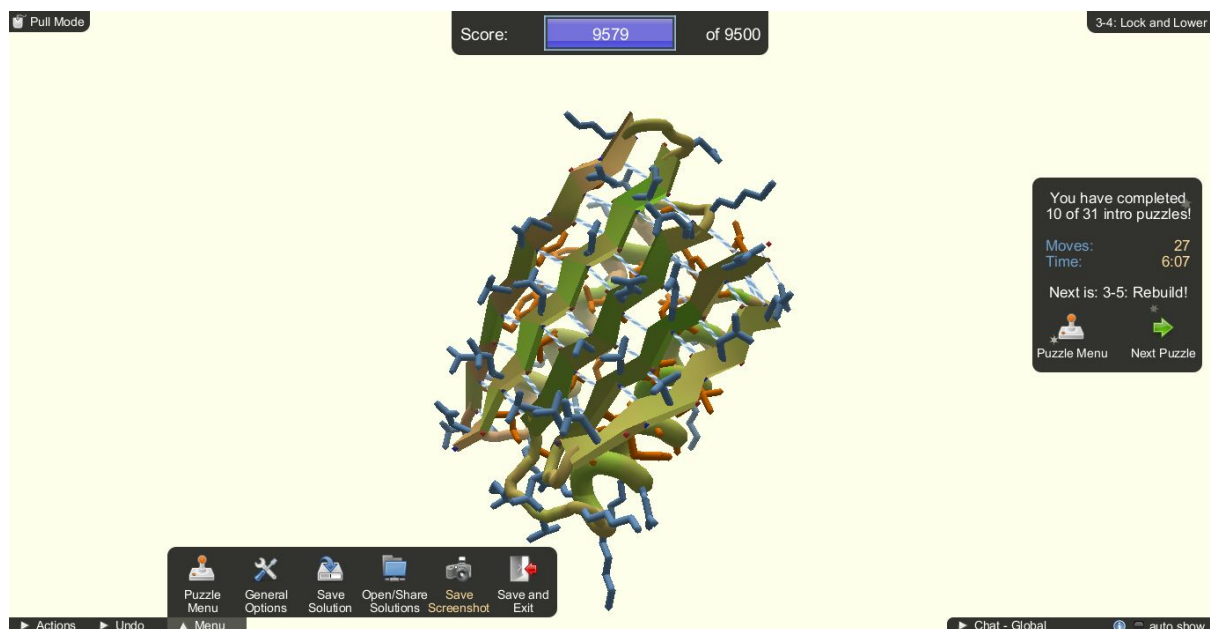
2.3) Ejemplo de giro en torno a los ángulos phi/psi de un residuo seleccionado, ¿que pasa cuando si sus vecinos tienen cadenas laterales voluminosas?





Cuando los vecinos tienen cadenas laterales voluminosas se restringe mucho la movilidad de los ángulos phi/psi. 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.

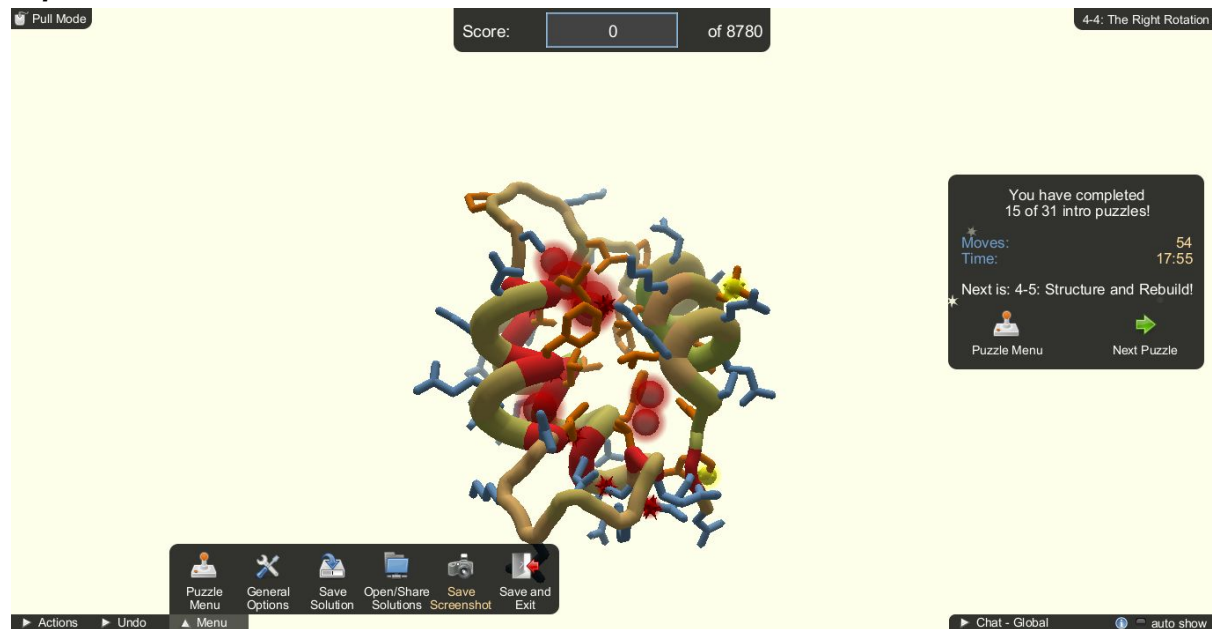


Desde el punto de vista algorítmico, ¿cuál de los estados de estructura secundaria les parece más difícil de programar?

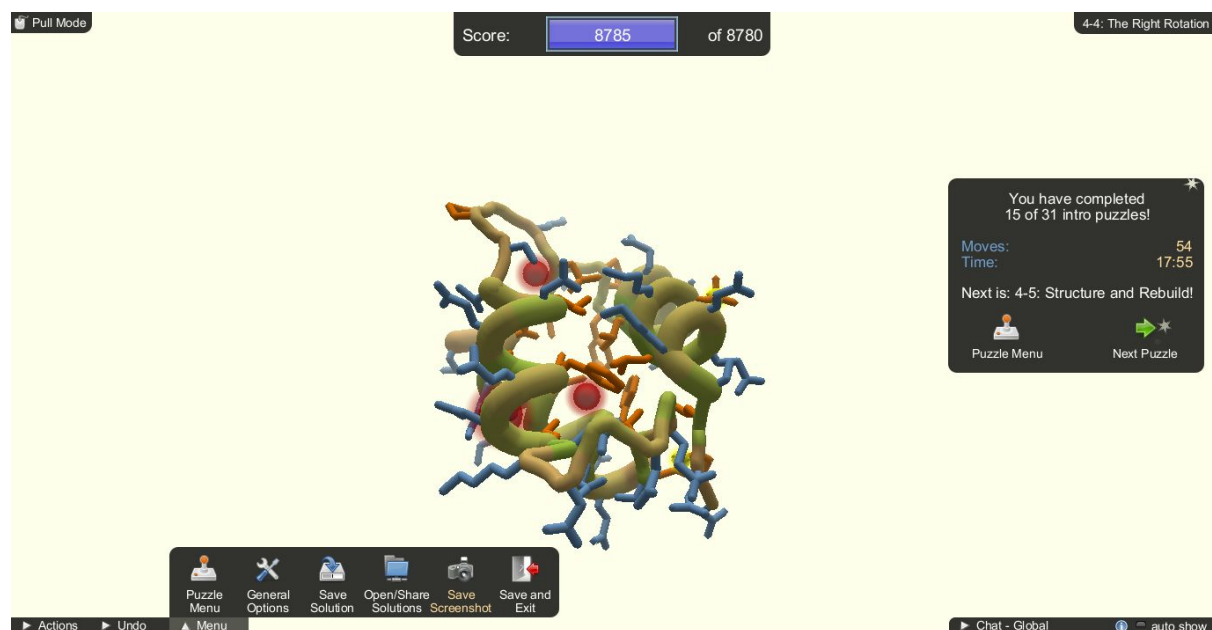
Las láminas β nos parecen más difíciles de programar debido a que tienes que considerar las interacciones mediante puentes de hidrógeno entre cada lámina, si es el caso en que interactúan varias, mientras que las hélices α tienen menos de estos enlaces puentes de hidrógeno y no suelen haber entre varias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

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

Expuesto:

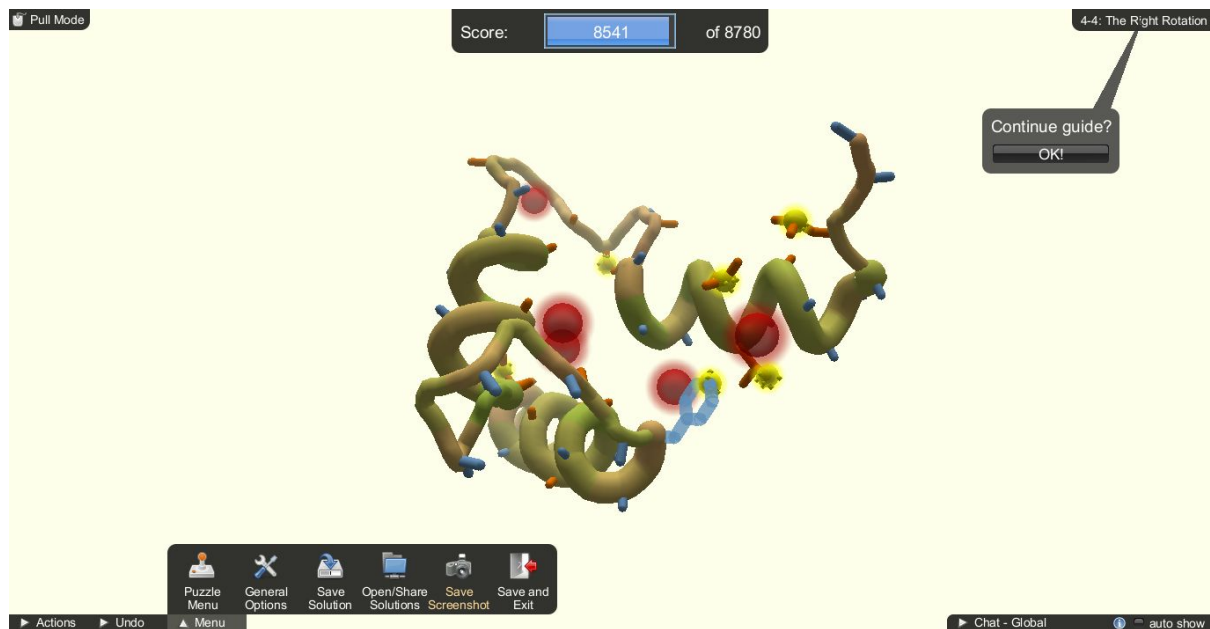


"Enterrado":

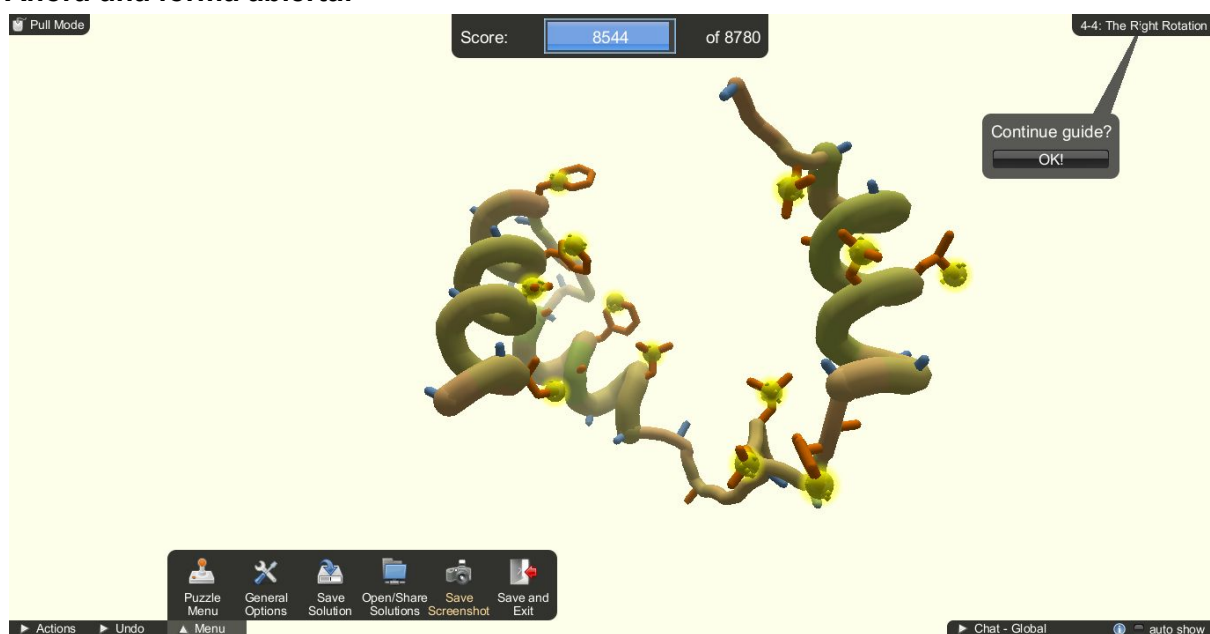


2.6) Ejemplo de conformaciones distintas con puntuaciones similares, para hacer patente el problema de evaluar lo correcto de una conformación.

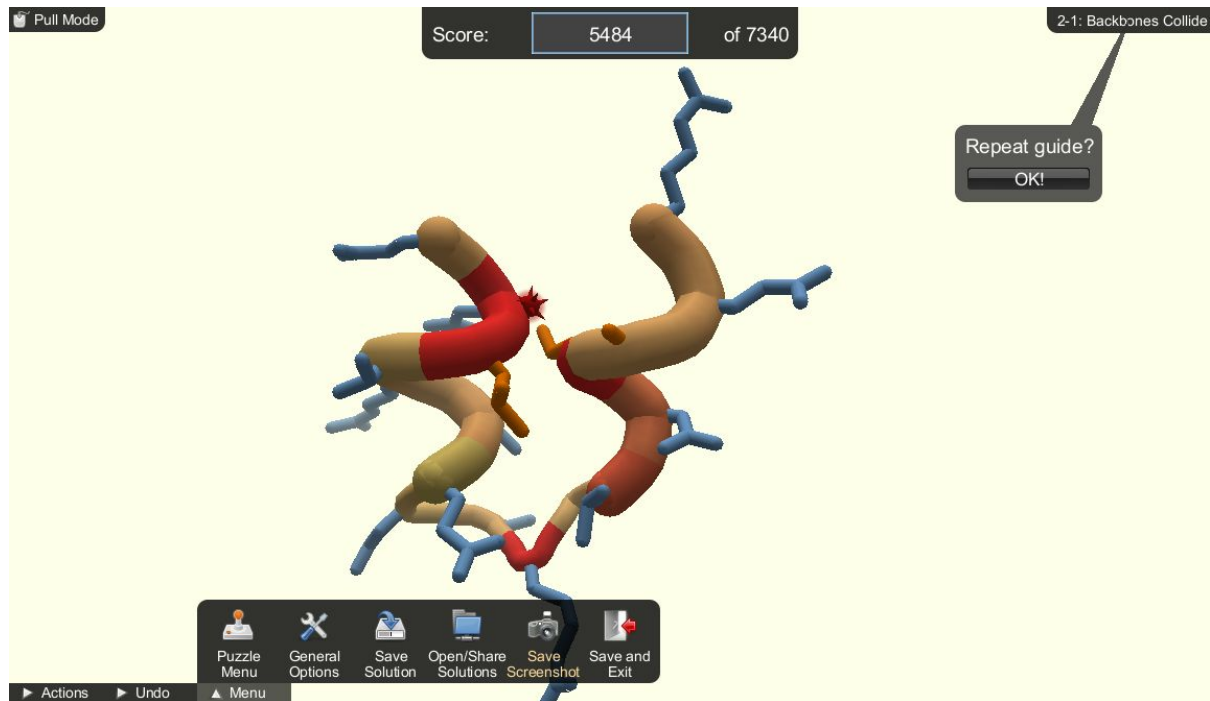
Obsérvese que es la misma proteína “4-4” y que la diferencia en *score* es de apenas tres unidades. **Primero una forma “cerrada”:**



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).