

Reporte 4: Modelado de proteínas
Bioinformática II: Bioinformática estructural
Licenciatura en Ciencias Genómica
Integrantes del equipo:
Jessica Samantha Cruz Ruiz
Lorena Elizabeth Fajardo Brígido

El modelado de proteínas ha sido un campo de estudio muy importante para la biología y para la bioinformática, debido a que de esta manera se ha intentado predecir cuáles son las posibles maneras en las que se puede plegar una proteína a partir de su secuencia. En este reporte se hace un modelado con proteínas ya reportadas experimentalmente, para concluir que, a partir de la estructura de dos proteínas parecidas en secuencia, se puede predecir su plegamiento.

Las instrucciones que se siguieron en este trabajo y sus respectivos resultados fueron los siguientes:

1) Elige una secuencia S de la superfamilia que elegiste para la tarea 3.

Se utilizó el motivo d1ymga1 de la secuencia de Aquaporina 0 del organismo *Bos taurus*, utilizada también en el ejercicio anterior.

2) Usando HHpred (<http://toolkit.tuebingen.mpg.de/hhpred>) selecciona al menos una estructura molde o template que puedas usar para modelar S, asegurándote que tiene menos del 90% de identidad si fuera posible.

La secuencia que se eligió fue la de 4NEF, la cual es una proteína homóloga de aquaporina en *Homo sapiens* y muestra una identidad de 61% con la proteína de *Bos taurus*.

3) De acuerdo con el ejemplo de http://eead-csic-compbio.github.io/bioinformatica_estructural/node34.html y la documentación de MODELLER construye dos modelos M1 y M2 de S y comprueba su estima de calidad con DOPE.

Los archivos pdb de los dos modelos construidos están en los archivos query.B999990001.pdb y query.B999990002.pdb, en la carpeta Reporte_3. Su valor de DOPE fue de -30225.38477 y -30289.07617 respectivamente, lo cual indica una buena calidad del modelaje.

4) Evalúa la calidad de los modelos M obtenidos comparándolos con la estructura conocida, que descargaste de SCOP en la tarea 3. Para ello puedes usar MAMMOTH. En tu informe por favor indica el alineamiento obtenido, el RMSD y al menos una imagen de su superposición para brevemente comentar las diferencias que observas entre cada modelo y la estructura experimental.

```
***** ***** ****
Prediction VGPVIGAGLG SLLYDFLLFP RLKSVSERLS ILK
Prediction HHHHHHHHHH HHHHHHHH -S SSS--HHHHH HHH
Experiment HHHHHHHHHH HHHHHHH --- SSSS--HHHH HHH
Experiment VGPVIGAGLG SLLYDFLLFP RLKSVSERLS ILK
***** ***** ****
```

Valor de RMSD entre modelos:

RMSD: 1.82 Angstrom

Superposición del modelo 1:



Superposición del modelo 2:



Tomando en cuenta los alineamientos, las imágenes producidas por Rasmol y el valor de RMSD entre los modelos podemos concluir que las diferencias entre ambos modelos y la secuencia comprobada experimentalmente es mínima, dada que su diferencia en Angstroms es muy poca y las imágenes que se sobreponen son bastante parecidas.