

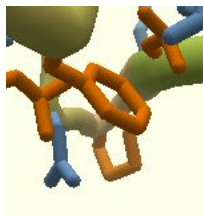
Reporte 1: Fold it
Bioinformática II: Bioinformática Estructural
Licenciatura en Ciencias Genómicas
Integrantes del equipo:
Jessica Samantha Cruz Ruiz
Lorena Elizabeth Fajardo Brígido

En la actualidad, Fold it es un juego muy famoso que consiste en predecir el plegamiento de distintas proteínas siguiendo varios fundamentos fisicoquímicos como la estructura de los aminoácidos, sus interacciones, la formación de estructuras secundarias y distintos tipos de enlaces, entre otros. Para comenzar a entender cómo se da este plegamiento es necesario conocer cómo estas características influyen en la proteína; por lo tanto, el objetivo de esta práctica consiste en familiarizarse con los conceptos del plegamiento de proteínas aprendiendo a utilizar este juego.

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

El reporte consiste en completar los puzzles de FoldIt al menos hasta el nivel 4-5, tomando capturas de pantalla que reflejan algunos de los conceptos teóricos que se hablaron en la mañana:

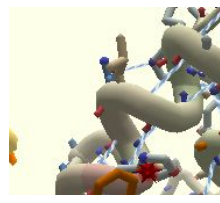
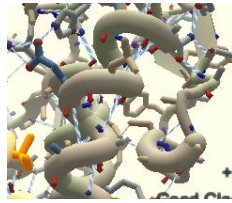
a) Ejemplo de a.a con cadena lateral aromática



b) Ejemplo de a.a. con cadena lateral chica

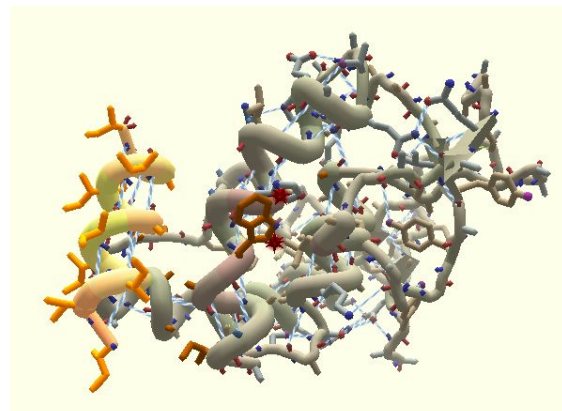
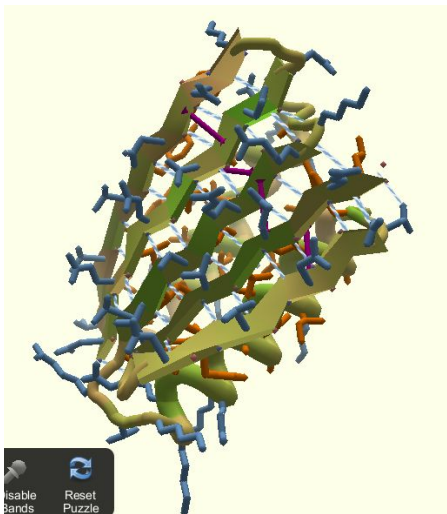


c) Ejemplo de giro en torno a los ángulos phi/psi de un residuo seleccionado; ¿qué pasa cuando sus vecinos tienen cadenas laterales voluminosas?



Cuando tienen cadenas laterales voluminosas muy cerca se estorban entre sí y no permite que la proteína se pliegue de manera correcta.

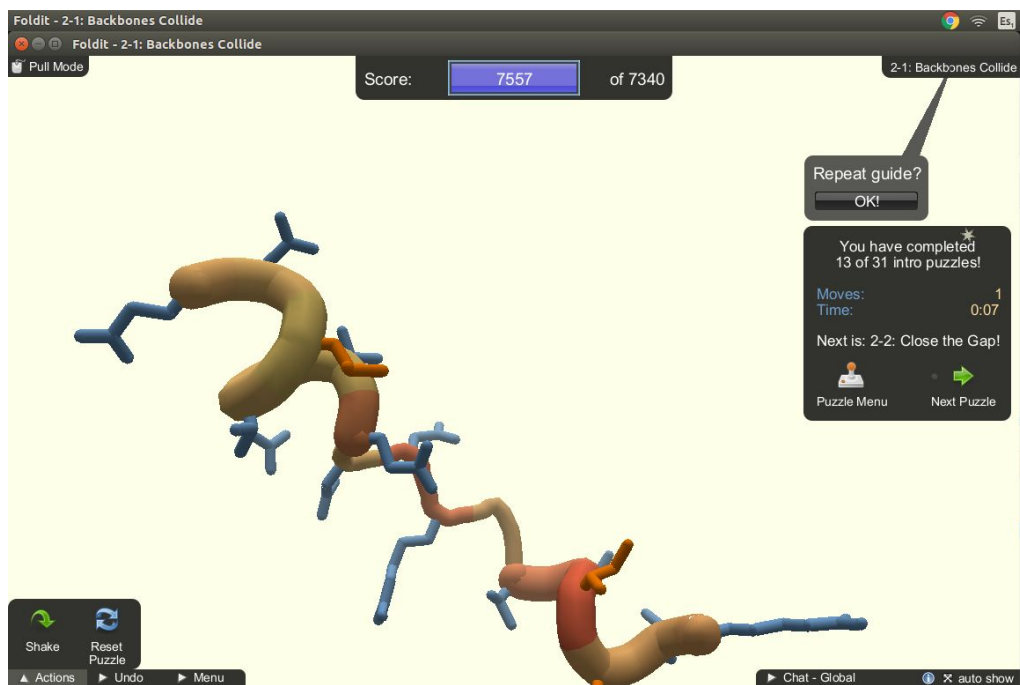
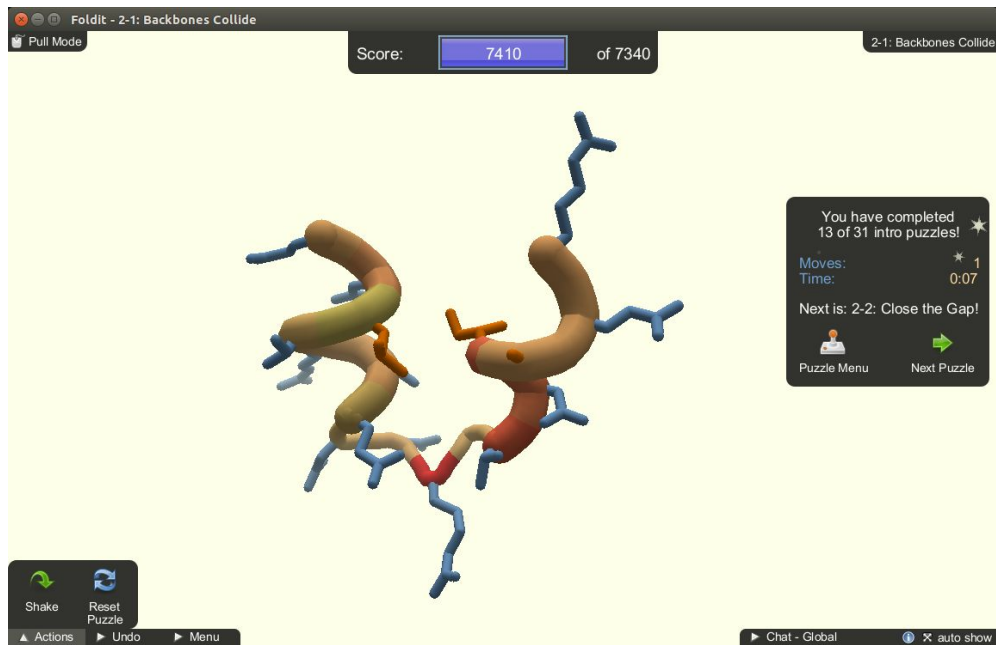
d) Ejemplo de puentes de hidrógeno entre residuos de una alfa-hélice y entre hojas de una lámina beta. Desde el punto de vista algorítmico, ¿cuál de los estados de estructura secundaria les parece más difícil de programar?



Las alfa-hélices, porque no se organizan de manera paralela o antiparalela como las hojas beta y por lo tanto no es tan sencillo predecir en donde se podrán formar los puentes de hidrógeno.

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

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



g) De acuerdo con

http://eead-csic-compbio.github.io/bioinformatica_estructural/node17.html calcula el tiempo que llevaría explorar todas las conformaciones posibles de uno de los péptidos o proteínas que utilicen en los puzzles.

Núm de aminoácidos: 13

X = 10

T = 10 a la menos 13

Tiempo total en el que llevaría a la proteína explorar todas las posibles conformaciones:

1x10 a la 10 (10000000000).