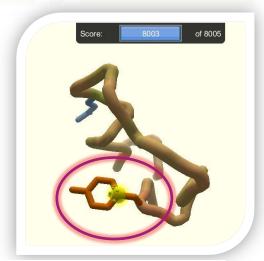
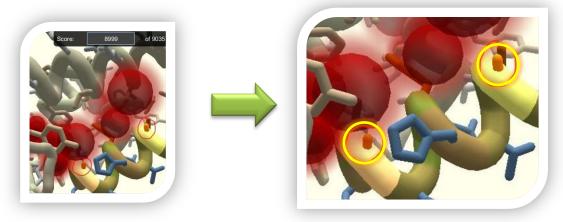
Eric Dilan Soriano Rosales Elisa Márquez Zavala



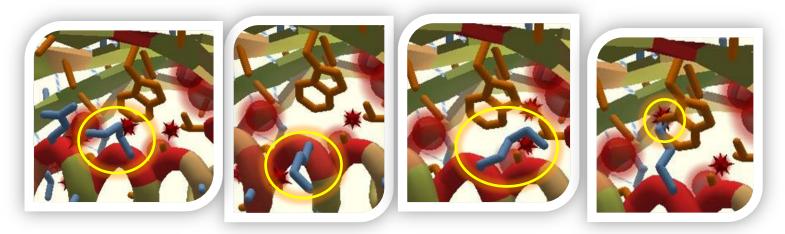
2.1) Ejemplo de aminoácido con cadena lateral aromática



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?



Si los vecinos tienen cadenas laterales voluminosas las posibilidades de giro se reducen debido a que el residuo puede chocar con sus vecinos.

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?

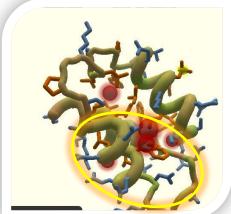




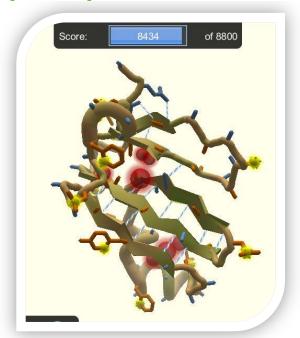
Creo que programar una beta plegada sería más difícil porque las alfa hélices son continuas y pueden depender más en patrones de secuencias locales mientras que las beta se extienden por varias regiones discontinuas

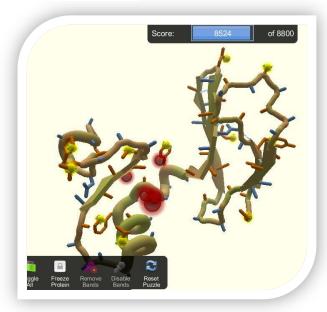
2.5) Ejemplo de residuo hidrofóbico expuesto y luego correctamente "enterrado" tras operaciones con los vecinos.





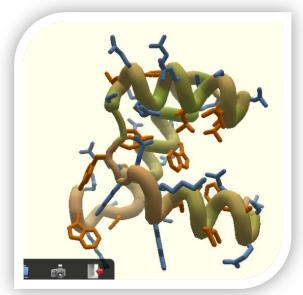
2.6) Ejemplo de conformaciones distintas con puntuaciones similares, para hacer patente el problema de evaluar lo correcto de una conformación.





2.7) 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.

Experimentalmente se ha medido en el laboratorio, que el tiempo que necesita un enlace sencillo para girar y una conformación determinada pueda transformarse en otra, es de 10^{-15} segundos. Digamos que cada aminoácido de una cadena puede tomar 10 estados diferentes, tomamos este polipéptido de 51 aminoácidos. Por lo tanto el cálculo sería de $10^{-15} * 10^{51} = 10^{36}$



Llegamos hasta el nivel 8-4

