

Trabajo Práctico N° 2

Fabrizio Britez

¿Por qué una célula quería destruir sus propias proteínas?

Puede que muchas veces las células consideren que ciertas proteínas no son necesarias para la fase en la que se encuentran, entonces se las marca químicamente para ser destruidas por otras proteínas.

¿Qué información nos provee esta página?

Esta página nos brinda diversa y muy profunda información sobre proteínas. Es una base de datos que recopila estudios sobre las proteínas para ser accedida por la comunidad de investigadores.

¿Cómo se determinó la estructura de esta proteína?

La estructura de esta proteína se obtuvo mediante el método X-RAY DIFFRACTION

A la izquierda vemos una representación de la estructura de ubiquitina. ¿Qué significan las cintas, las flechas y las regiones angostas?

Esa representación muestra la estructura terciaria de la proteína.

¿Representa esa imagen a la realidad del sistema biológico?

No. Es solo una representación de la estructura de la proteína, puesto que como sabemos los átomos tienen cierto movimiento y esta representación es una aproximación estadística de cómo deberían de estar dispuestos los aminoácidos de esta proteína en el espacio.

La estructura 1UBQ fue “refinada a una resolución de 1.8 Angstroms”. Éste es el error asociado al experimento: mientras mayor es la resolución, menor es la certeza al determinar la posición de cada átomo. ¿Cuál es la utilidad y los condicionamientos de usar un modelo científico que sabemos inexacto?

Porque nos permite tener una mejor aproximación a cómo es la estructura de la proteína y nos permite estudiarla mejor. Además conocer la inexactitud de esta representación nos permite entender que los análisis que hagamos sobre las mismas no es absoluta y debemos contemplar esta inexactitud en nuestros modelos

¿Qué diferencias y similitudes notamos respecto de la representación inicial?

Se mantiene la forma pero cambian los colores los cuales explican

En el menú de la derecha hay opciones de distintos tipos de representación y formas de colorear la estructura tridimensional. ¿Para qué podría ser útil visualizar lo mismo de distintas maneras?

En este caso, no sirve tener mayor resolución ya que te permite determinar que se trata de dos estructuras son distintas. Teniendo mayor resolución, los cambios o

distancias mínimas no son “notorias”, menor resolución permite notar estas distancias con mayor facilidad.

Actualmente es una de las mejores herramientas que hay hasta el momento para hacer este tipo de estudios además de que la información que permite extraer es suficiente para hacer una representación cercana de cómo podría llegar a ser una proteína en cuestión y tener suficiente información como para realizar predicciones.

¿Qué información esperaríamos encontrar como resultado un experimento destinado a determinar la estructura terciaria de una molécula biológica?

En un experimento destinado a determinar la estructura terciaria de una molécula esperaríamos encontrar la disposición de cada átomo en el espacio, datos de ese átomo en particular.

Podemos explorar el contenido del archivo que acabamos de descargar si lo observamos con un editor de texto. Haciendo clic con el botón derecho del mouse sobre el archivo descargado, usemos la opción Abrir con y seleccionemos el Bloc de Notas u otro editor de texto. ¿En qué consiste un archivo PDB?

El tipo de archivo PDB es el formato de base de datos estándar utilizado por los dispositivos PDA basados en Palm, Pegasus, Quicken y otros. Este formato de datos almacena varios tipos de información, como libros electrónicos, documentos de texto, imágenes, mapas, hojas de cálculo, etc., en un formato estructurado. Es indispensable saber qué programa creó el archivo PDB para poder abrirlo. Solo los programas responsables de su creación pueden mostrarlo y procesarlo correctamente.

Desplacémonos por el archivo hasta encontrar las líneas que comienzan con la palabra ATOM. ¿Qué tipo de información brinda esta sección?

En cada fila de datos que comienza con la palabra ATOM podemos encontrar información de los átomos que componen la molécula.

La información puede ser interpretada de la siguiente manera:

COLUMNA	TIPO DE DATO	CAMPO	DEFINICIÓN
1 - 6	Record name	ATOM	
7 - 11	Integer	serial	Atom serial number.
13 - 16	Atom	name	Atom name.
17	Character	altLoc	Alternate location indicator.
18 - 20	Residue name	resName	Residue name.
22	Character	chainID	Chain identifier.
23 - 26	Integer	resSeq	Residue sequence number.
27	AChar	iCode	Code for insertion of residues.
31 - 38	Real(8.3)	x	Orthogonal coordinates for X in Angstroms.

39 - 46	Real(8.3)	y	Orthogonal coordinates for Y in Angstroms.
47 - 54	Real(8.3)	z	Orthogonal coordinates for Z in Angstroms.
55 - 60	Real(6.2)	occupancy	Occupancy.
61 - 66	Real(6.2)	tempFactor	Temperature factor.
73 - 76	LString(4)	segID	Segment identifier, left-justified.
77 - 78	LString(2)	element	Element symbol, right-justified.
79 - 80	LString(2)	charge	Charge on the atom.

Fuente: https://cdn.rcsb.org/wwpdb/docs/documentation/file-format/PDB_format_1996.pdf

¿Podríamos extraer de este archivo información sobre la estructura primaria de la proteína en cuestión?

Si, podemos obtener información de la estructura primaria. La misma está identificada en la columna *resName* que indica que aminoácido conforma cada átomo. Entonces si leyéramos solo la columna *resName* de arriba hacia abajo, podríamos ir agrupando los aminoácidos hasta obtener la cadena.

¿Cómo se presenta dicha información y qué significa la representación? Desde el punto de vista computacional: ¿de qué tipo de dato se trata esta información?

Esta información está representada con el código de 3 caracteres que identifica a cada uno de los aminoácidos. Desde el punto de vista computacional se trata de un String de 3 caracteres.

¿Considera que el formato PDB es útil para presentar los resultados del experimento?

Observamos que la información respeta cierta estructura interna. ¿Cuáles son los beneficios y las limitaciones de imponer una estructura para comunicar los resultados de un experimento?

El formato PDB permite compartir información de los resultados de los experimentos de una manera simplificada. Puesto el archivo es un archivo liviano. El contenido es legible por un humano y puede ser interpretado sin necesidad de tener un programa interpreter, esto se debe a que el archivo respeta una cierta estructura interna para cada sección de datos. La limitación es que quien no conozca cómo se organiza esa estructura, no podría entender el archivo y si no cuenta con el programa interpreter correcto, no podrá leer la información del mismo.

Hemos visto que las proteínas tienen estructura tridimensional y hemos podido observar algunas características de las mismas. ¿Será igual con los ácidos nucleicos?

Si, ya que se compondrían de lo visto previamente, en distinta escala y en una estructura agrupada de proteínas.

Rosalind Franklin es una científica muy relevante, que tuvo menos reconocimiento del merecido. Contanos sobre los procedimientos que puso a punto Rosalind.

Rosalind Franklin trabajaba en descubrir la estructura del ADN con la cristalografía de rayos X. Con este método, Rosalind logró una imagen de la estructura de doble hélice del ADN, fotografía conocida como Fotografía 51.