

# EFECTO DE LA AMANTADINA SOBRE LA PROTEINA “E” TRANSMEMBRANA DEL VIRUS SARS-COV-2.

Lizbeth Aida Ortega Pineda

Enero 2021

Materia: Bioinformática

Tema: AutoDock-amantadina Proteína E

# Descarga de proteína en GenBank.pdb

The screenshot shows the RCSB PDB website interface. The main content area displays the entry 7K3G, titled "SARS-CoV-2 Envelope Protein Transmembrane Domain by Solid-State NMR". A dropdown menu is open under the "Download Files" button, showing options: FASTA Sequence, PDB Format, PDB Format (Header), mmCIF Format, and mmCIF Format (Header). The left sidebar shows a 3D view of the protein structure and a "Macromolecule Content" section with details: Total Structure Weight: 16.81 kDa, Atom Count: 1190, Residue Count: 155, and Unique protein chains: 1. The bottom of the page shows a Windows taskbar with various application icons and a system clock indicating 06:56 p.m. on 05/01/2021.

RCSB PDB | Deposit | Search | Visualize | Analyze | Download | Learn | More | MyPDB

7K3G  
SARS-CoV-2 Envelope Protein Transmembrane Domain by Solid-State NMR  
DOI: 10.2210/pdb7K3G/pdb BMRB: 30795  
Classification: VIRAL PROTEIN  
Organism(s): Severe acute respiratory syndrome coronavirus 2  
Expression System: Escherichia coli BL21(DE3)  
Mutation(s): No  
Deposited: 2020-09-11 Released: 2020-09-30  
Deposition Author(s): Mandala, V.S., Hong, M., McKay, M.J., Shcherbakov, A.S., Dregni, A.J.  
Funding Organization(s): National Institutes of Health/National Institute of General Medical Sciences (NIH/NIGMS)

Experimental Data Snapshot  
Method: SOLID-STATE NMR  
Conformers Calculated: 192  
Conformers Submitted: 10  
Selection Criteria: structures with the lowest energy

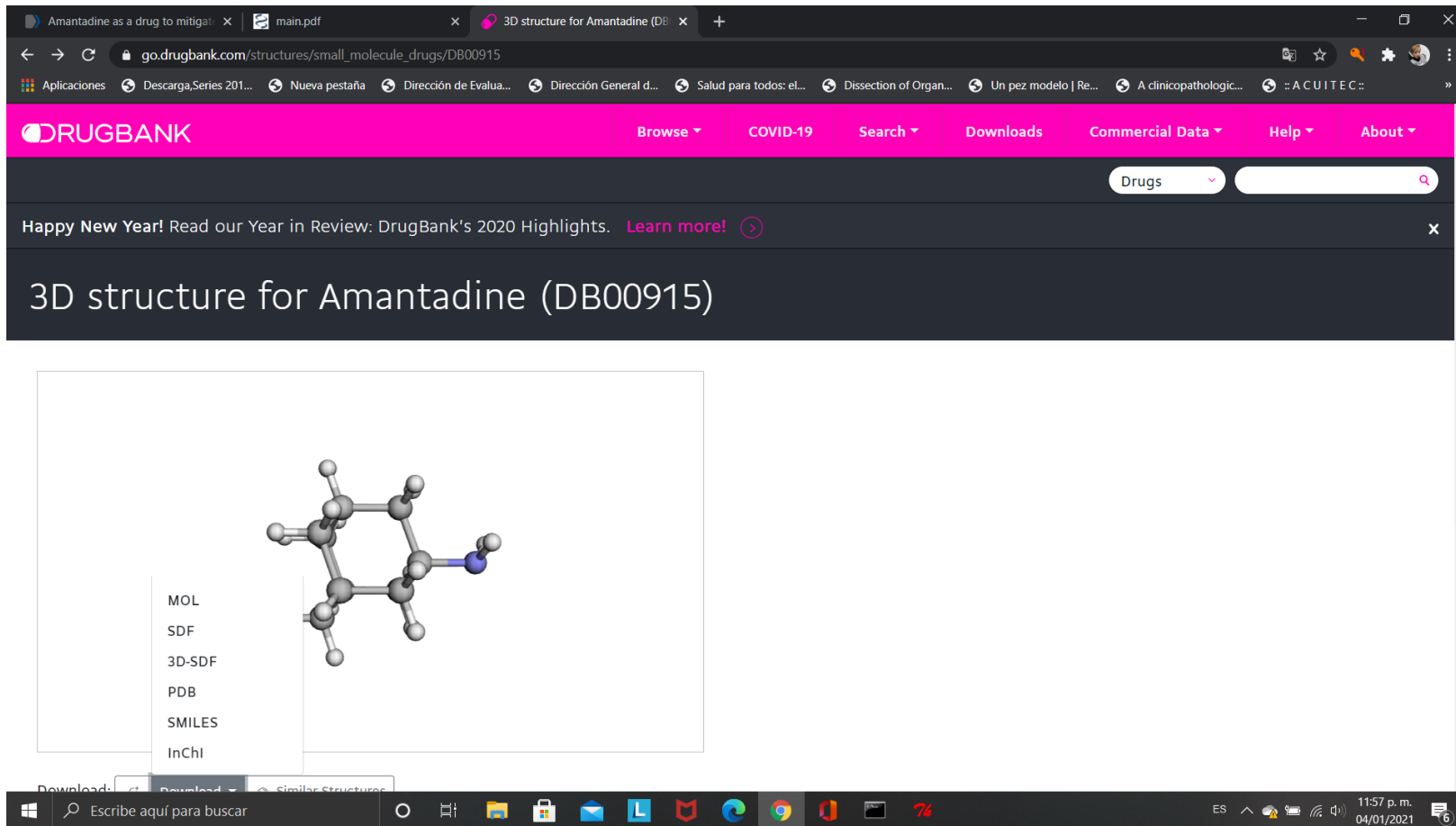
wwPDB Validation  
3D Report Full Report  
Metric Percentile Ranks Value  
Clashscore 12  
Ramachandran outliers 1.7%  
Sidechain outliers 29.0%  
Worse Better  
Percentile relative to all structures  
Percentile relative to all NMR structures

Macromolecule Content  
• Total Structure Weight: 16.81 kDa  
• Atom Count: 1190  
• Residue Count: 155  
• Unique protein chains: 1

This is version 2.3 of the entry. See complete history.

Esta opción la vimos y  
Descargamos durante las clases  
De Python y AutoDock.

# Descarga de molécula de Amantadina en formato pdb

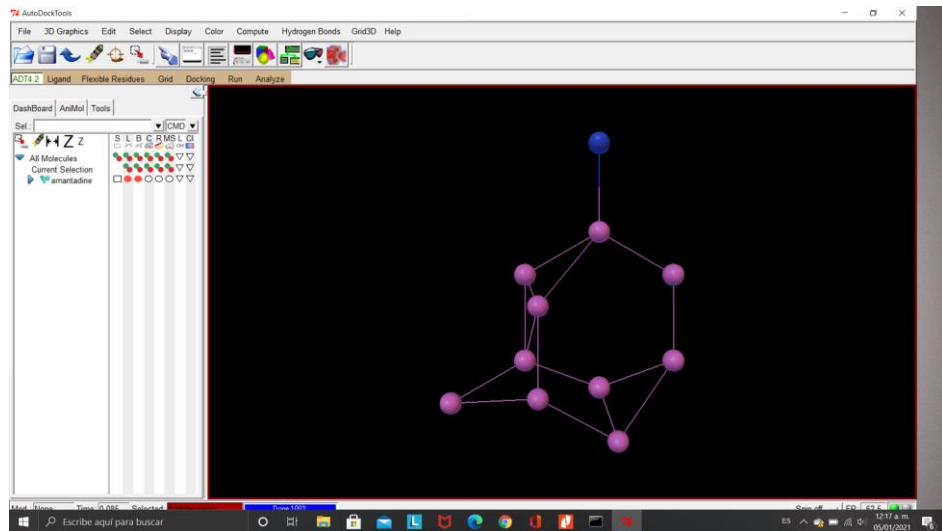


The screenshot shows a web browser window with the DrugBank website. The address bar displays 'go.drugbank.com/structures/small\_molecule\_drugs/DB00915'. The page title is '3D structure for Amantadine (DB00915)'. A 3D ball-and-stick model of the Amantadine molecule is shown. To the left of the model is a dropdown menu with the following options: MOL, SDF, 3D-SDF, PDB, SMILES, and InChI. The 'PDB' option is highlighted. The browser's taskbar at the bottom shows the Windows logo, a search bar, and various application icons. The system clock in the bottom right corner indicates the time is 11:57 p. m. on 04/01/2021.

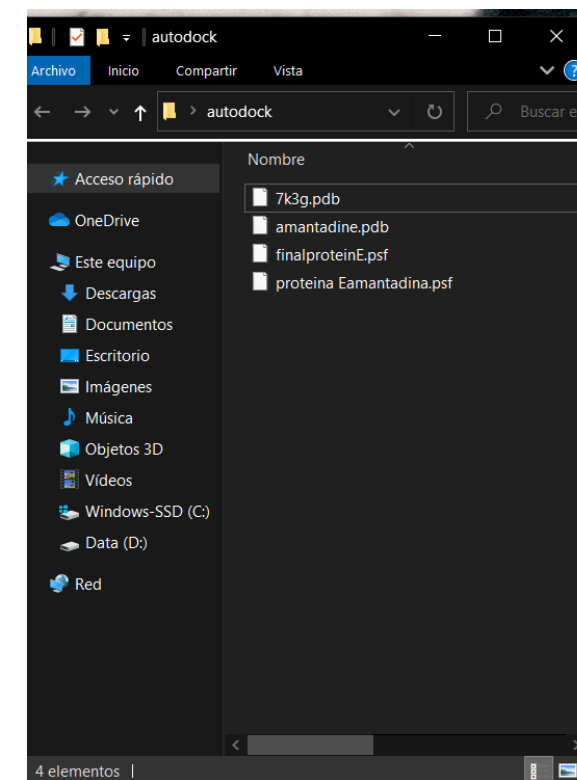
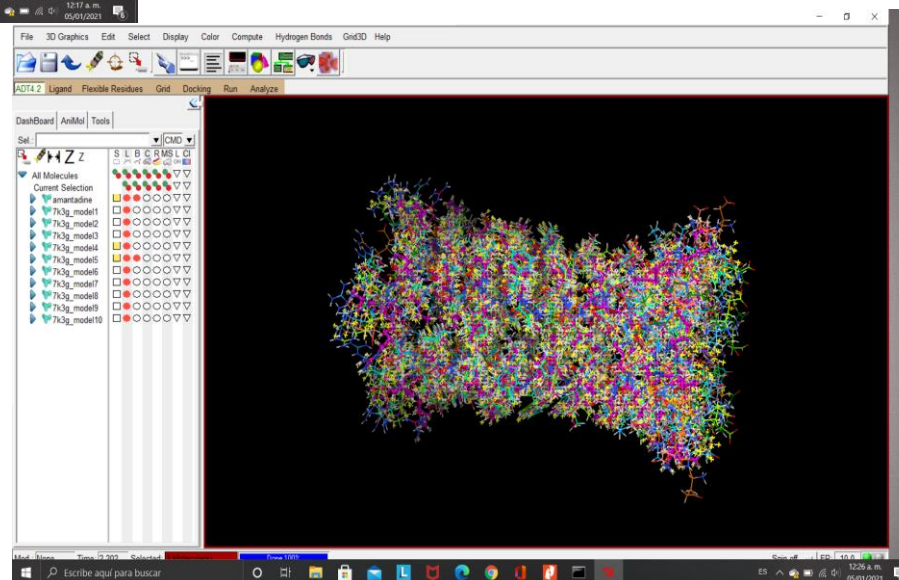
Esta banco de moléculas de drogas la analizamos Durante una clase impartida en La materia .

**Se descargan los archivos en formato pdb.**

# Análisis en AutoDock.Tools de las moléculas

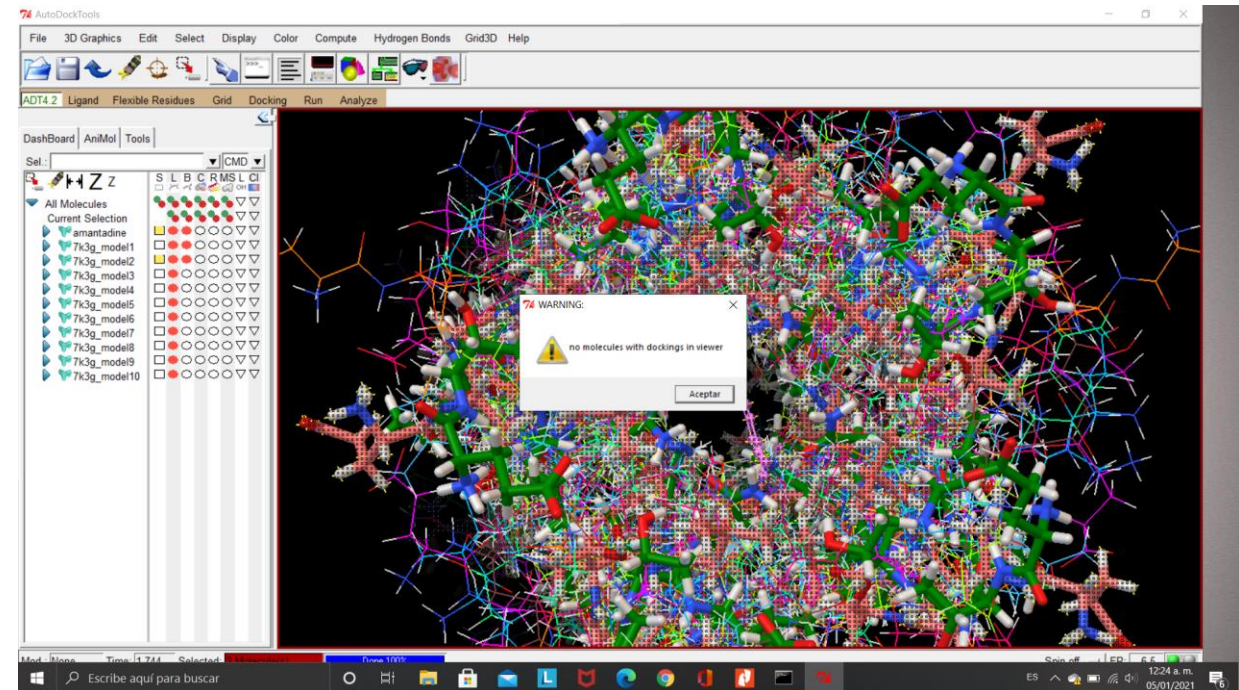
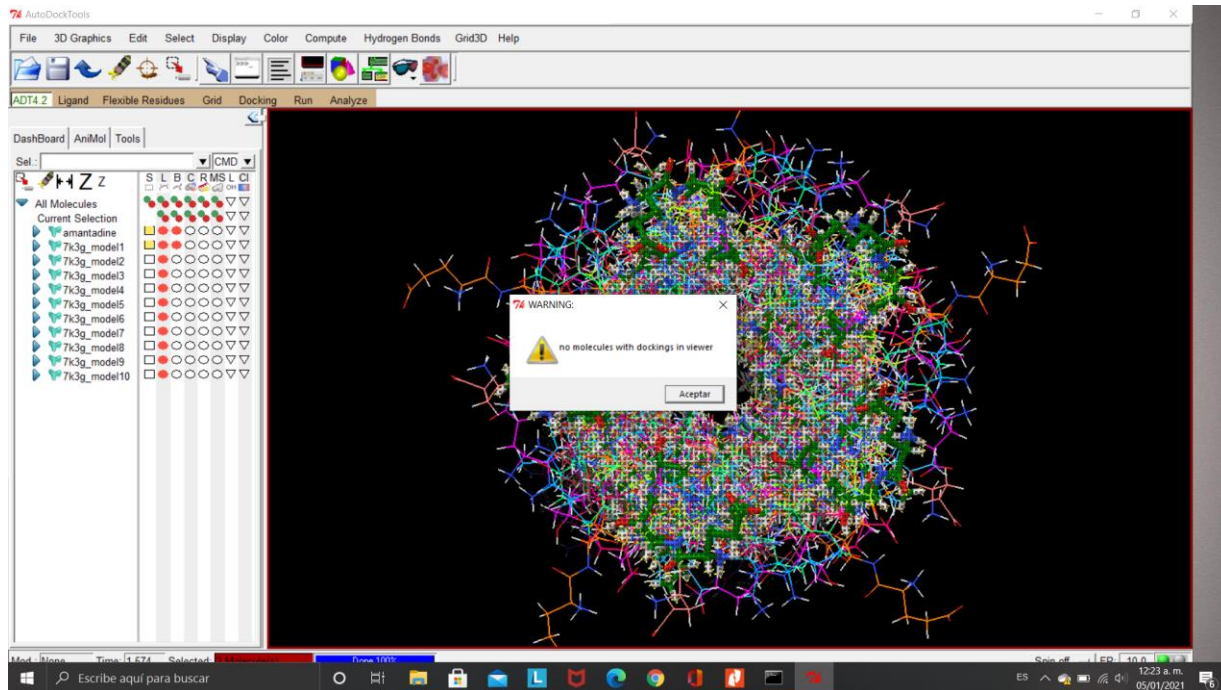


Se abren los archivos en pdb de  
amantadina y proteína E 7k3g



# Análisis en AutoDockTools de las moléculas

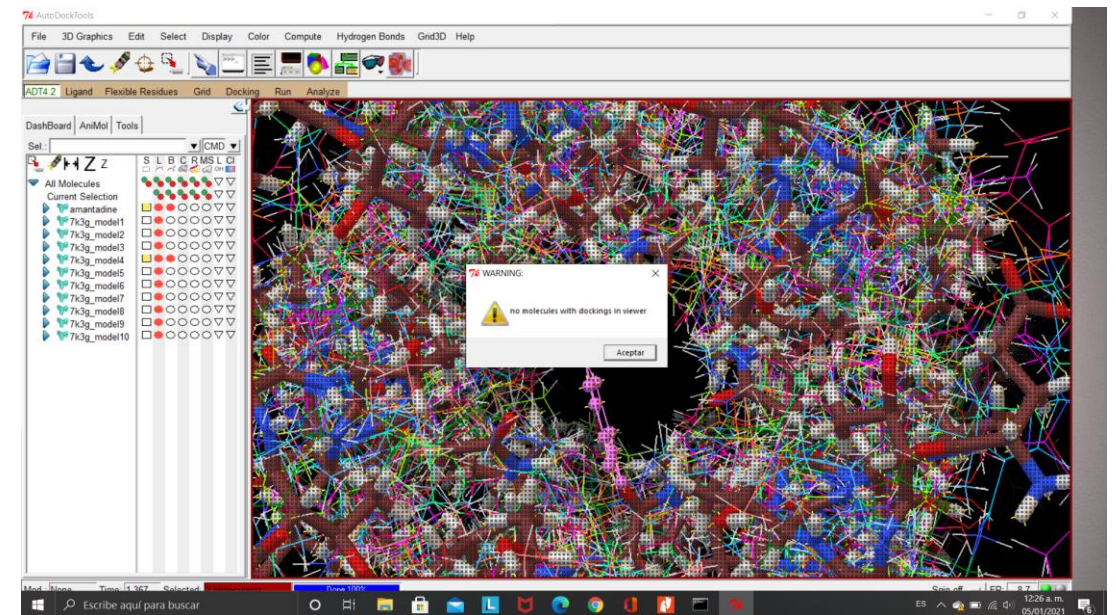
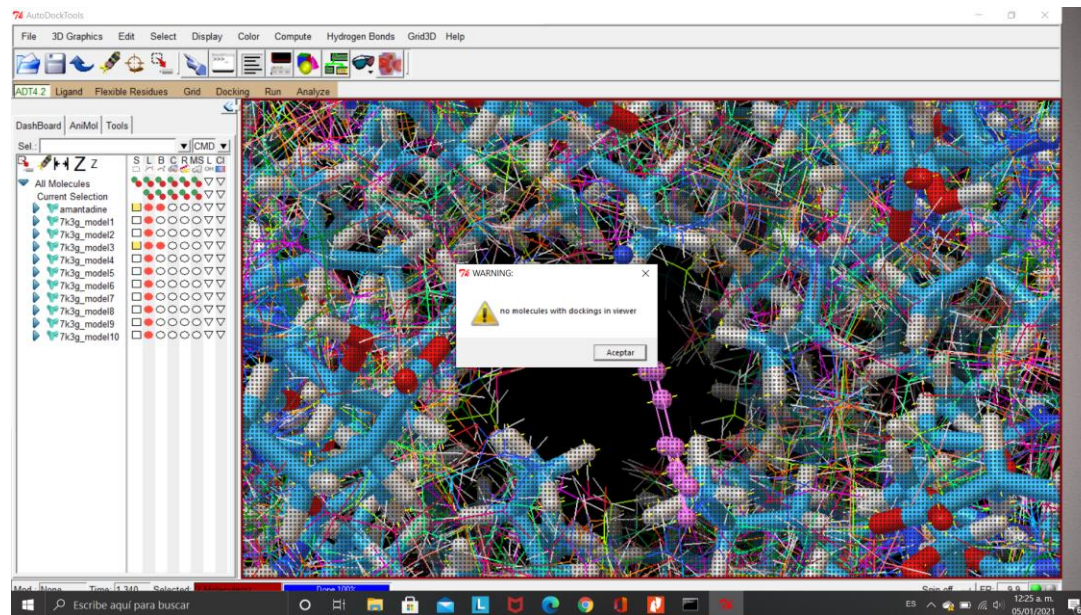
Se abren los archivos en pdb de amantadina y proteína E 7k3g y por cada modelo de la proteína E se realiza el análisis.





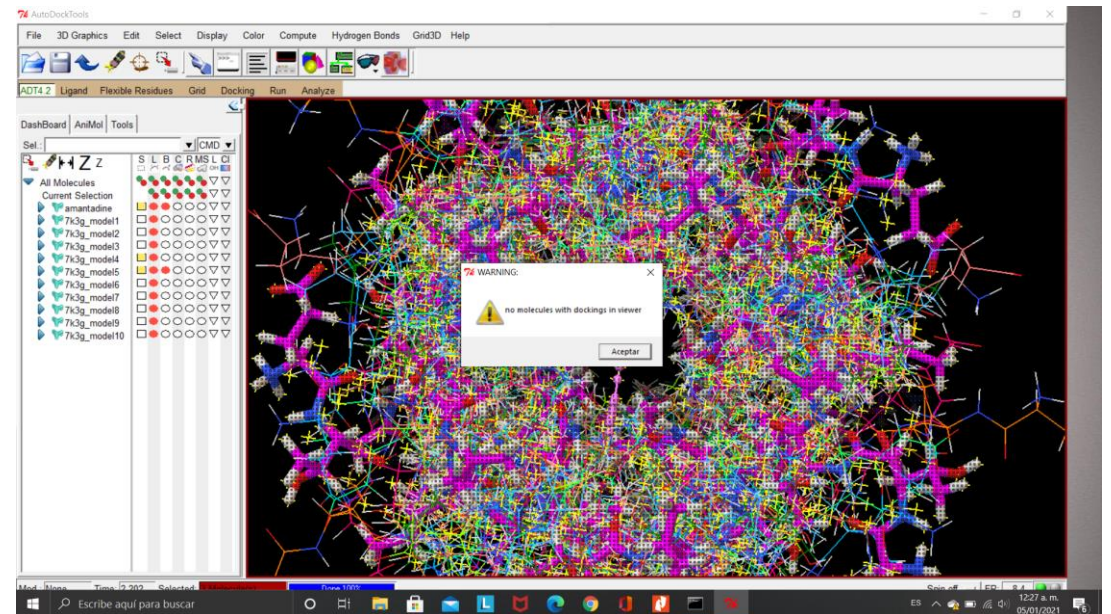
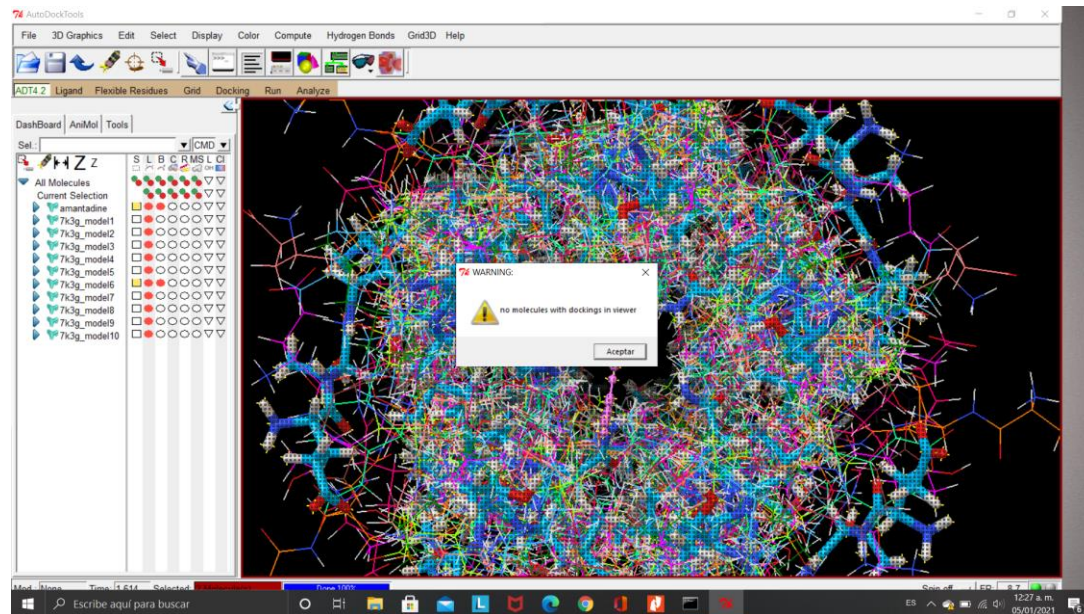
# Análisis en AutoDock.Tools de las moléculas

- Se abren los archivos en pdb de amantadina y proteína E 7k3g y por cada modelo de la proteína E se realiza el análisis.



# Análisis en AutoDock.Tools de las moléculas

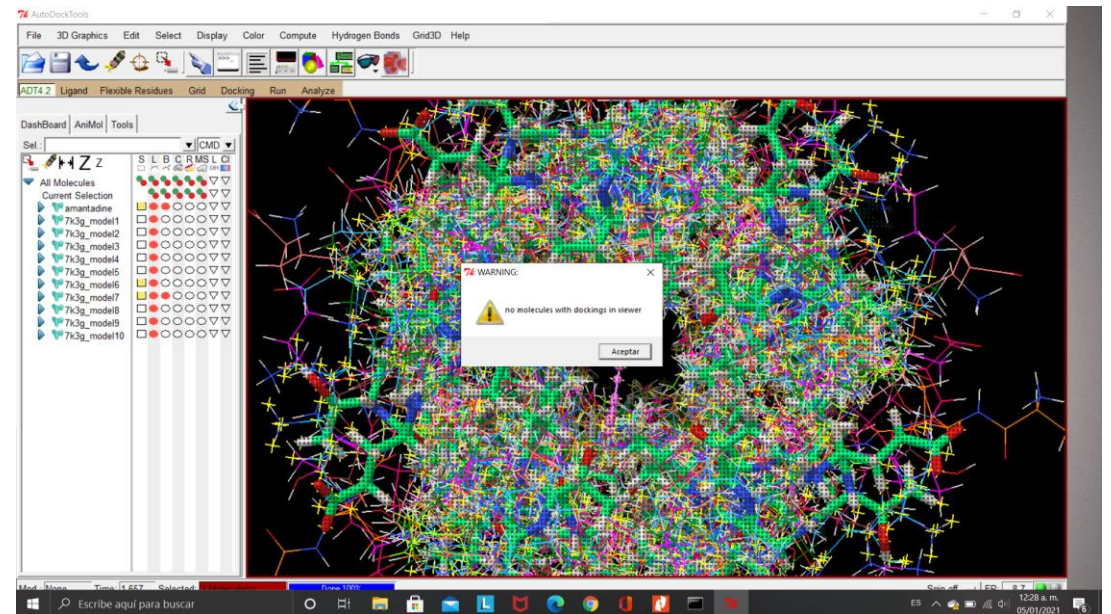
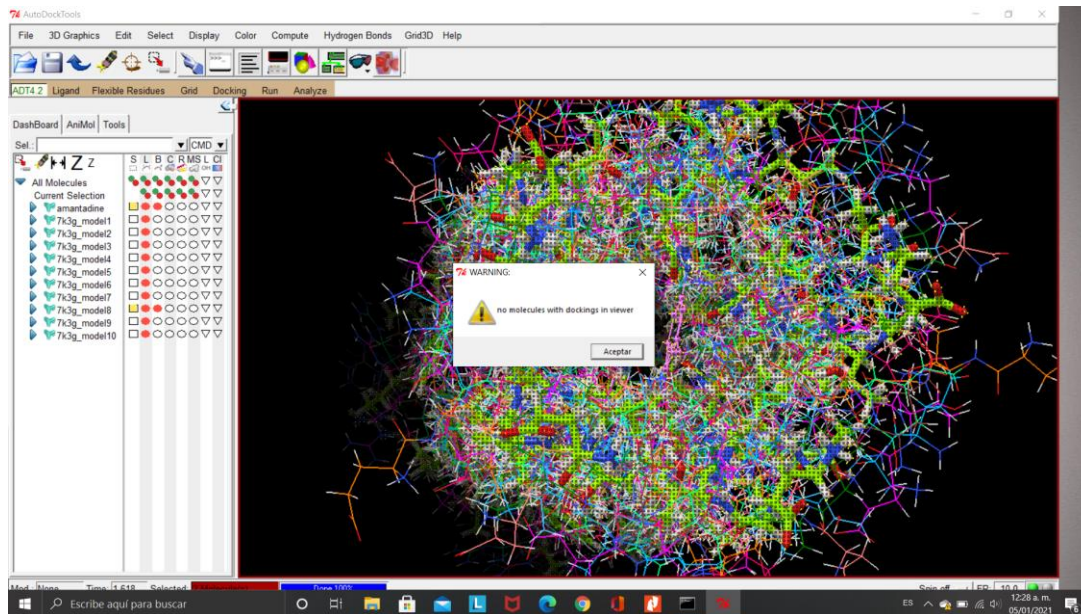
- Se abren los archivos en pdb de amantadina y proteína E 7k3g y por cada modelo de la proteína E se realiza el análisis.





# Análisis en AutoDock.Tools de las moléculas

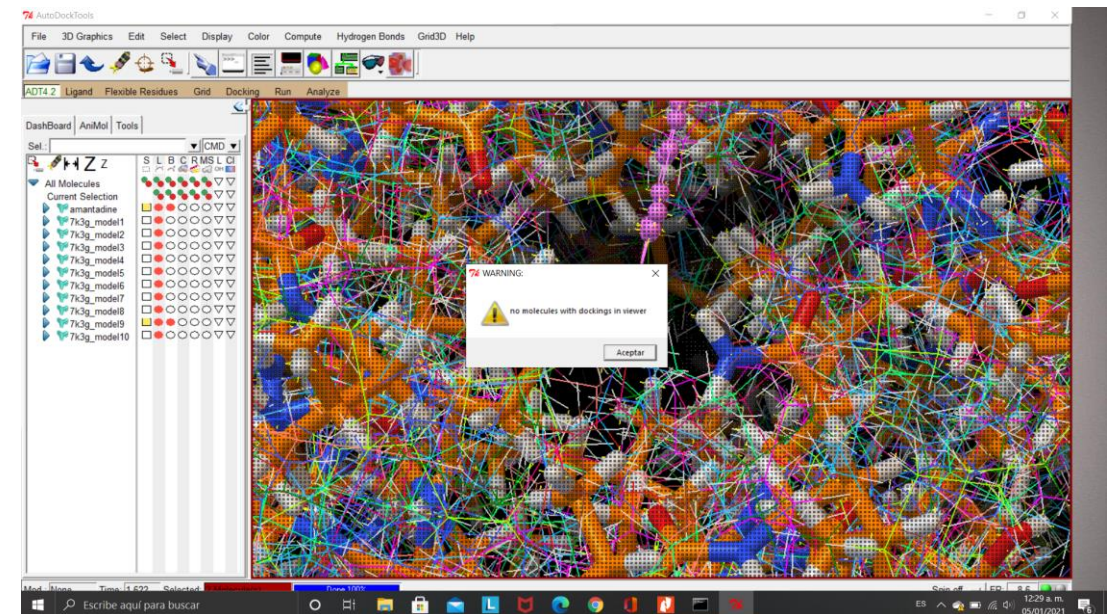
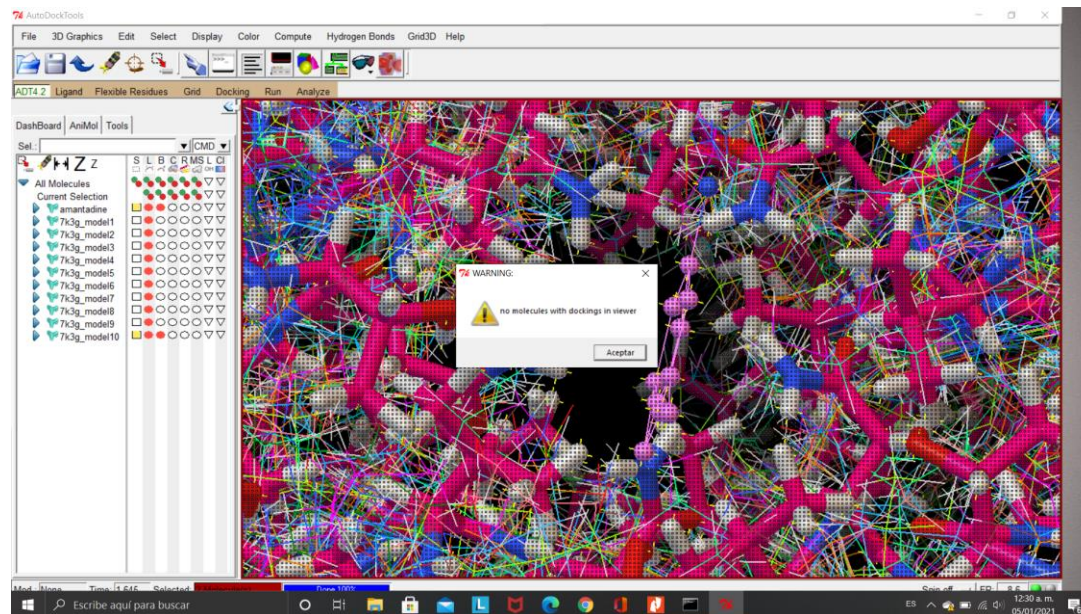
- Se abren los archivos en pdb de amantadina y proteína E 7k3g y por cada modelo de la proteína E se realiza el análisis.





# Análisis en AutoDock.Tools de las moléculas

- Se abren los archivos en pdb de amantadina y proteína E 7k3g y por cada modelo de la proteína E se realiza el análisis.



# Análisis en AutoDock.Tools de las moléculas

- Al finalizar el análisis se guardan los cambios, generando un archivo con la terminación .psf

