

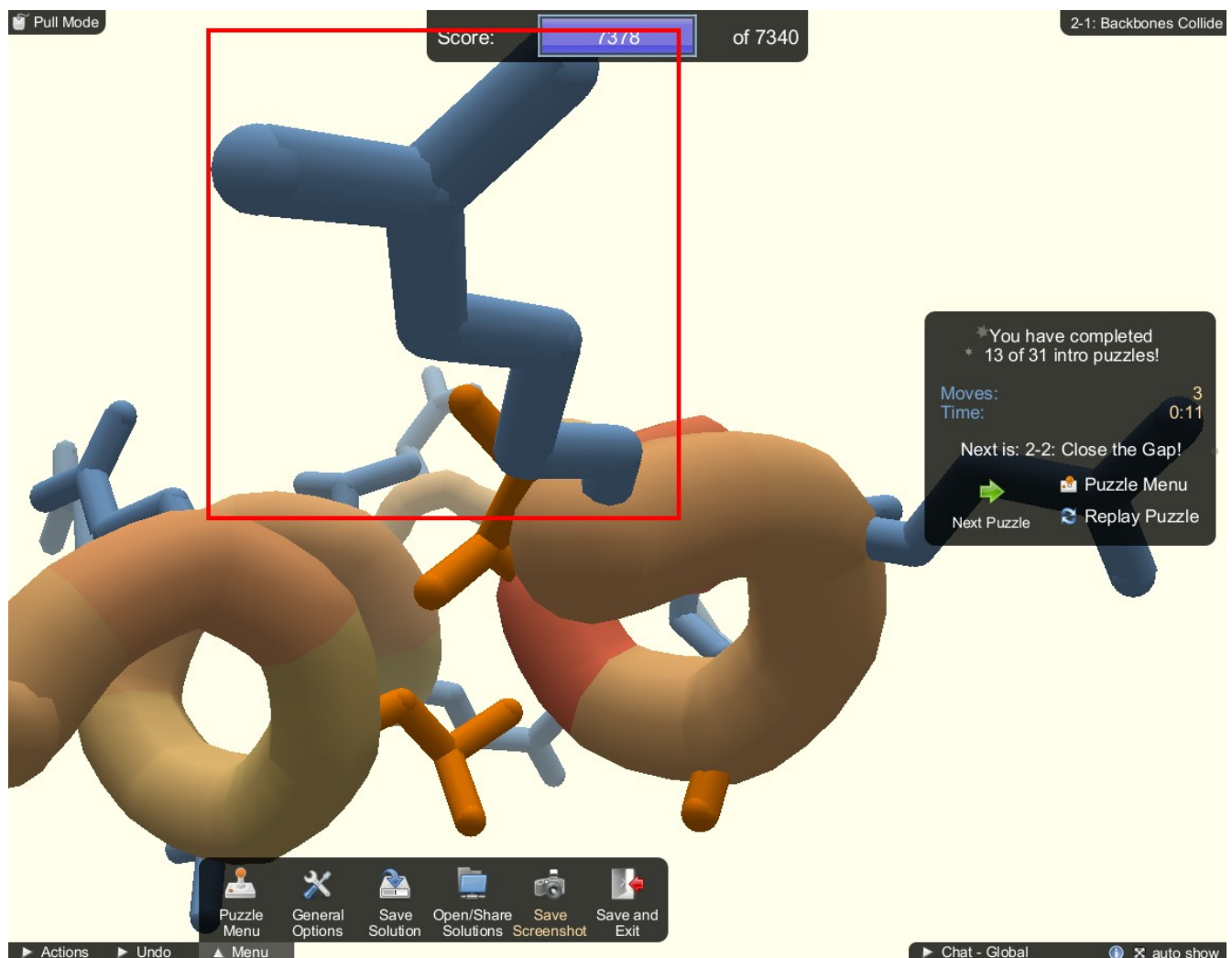
Reporte Tarea 1: Plegamiento de proteínas

Lucía Graña

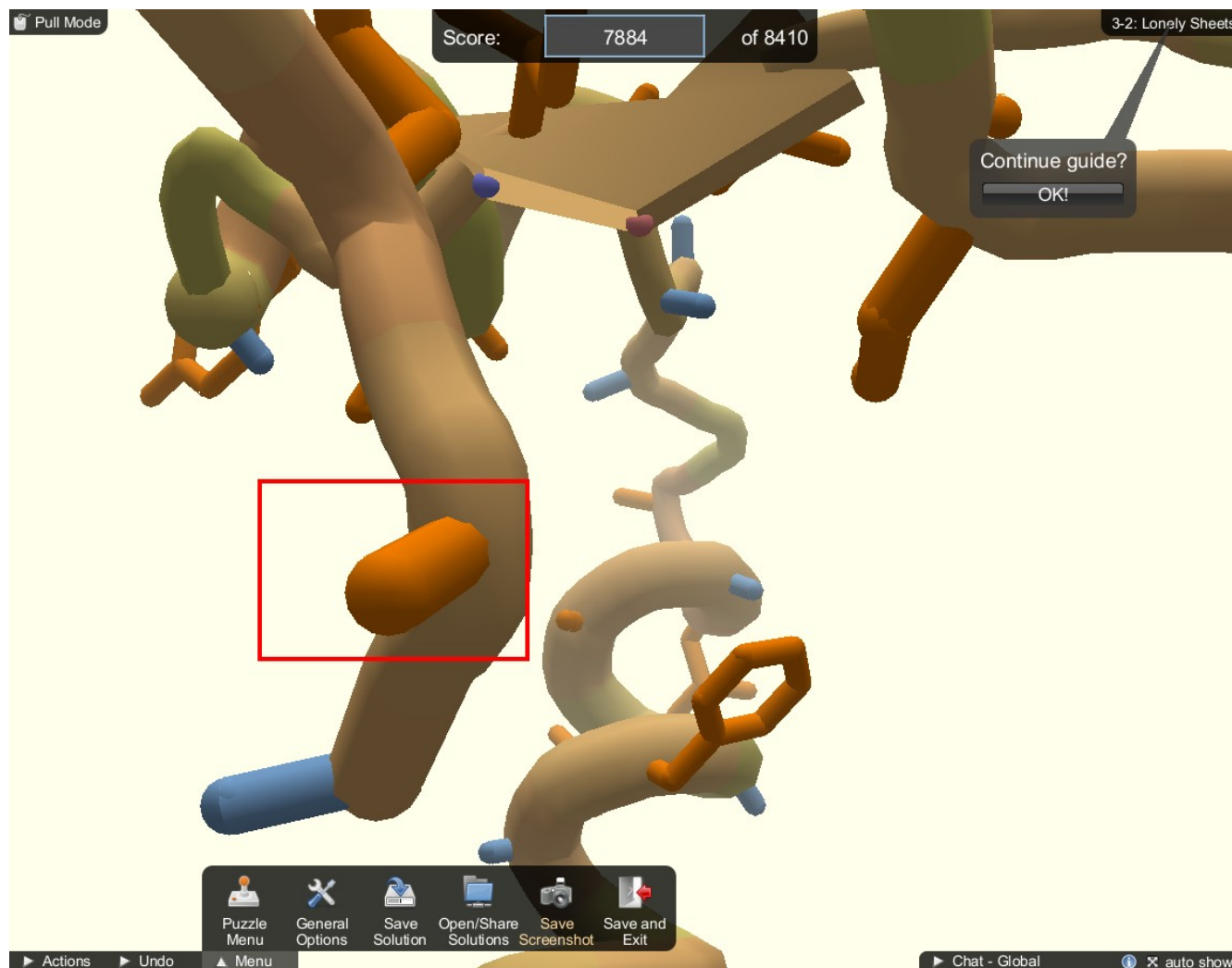
Para realizar esta tarea se utilizó el programa Foldit. Este programa permite modificar el plegamiento de proteínas con el fin de obtener un plegamiento óptimo (no necesariamente la forma nativa, porque generalmente no la sabemos). El programa toma en cuenta principalmente interacciones como la formación de puentes de hidrógeno y la hidrofobicidad en un medio acuoso, para otorgar un puntaje al plegamiento. Los residuos hidrofóbicos deben estar al interior del plegamiento mientras que los hidrofílicos pueden estar expuestos al solvente.

Durante el ejercicio se tomaron capturas de pantalla de modo de ilustrar algunos conceptos:

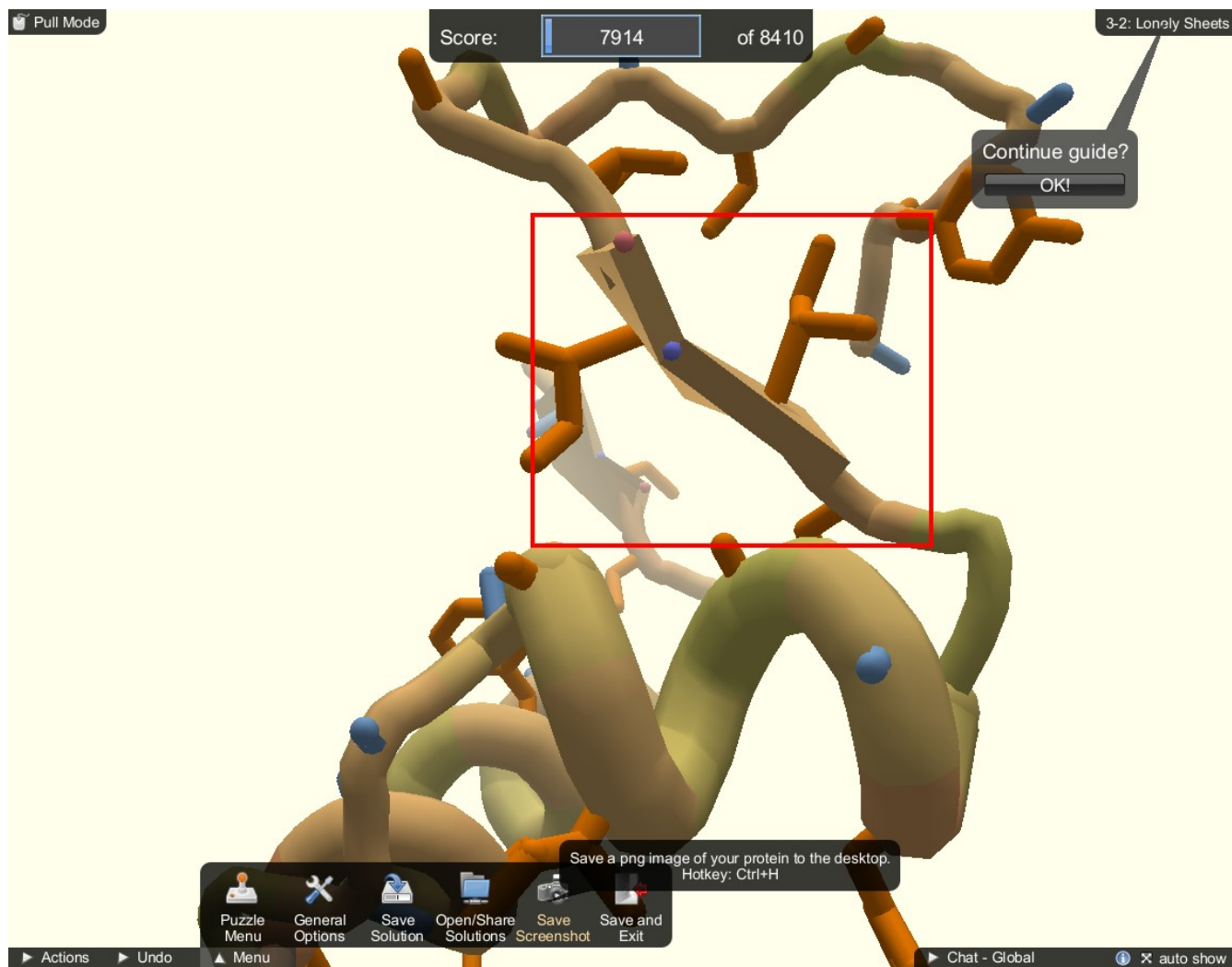
1. Ejemplo de un aminoácido con cadena lateral larga:



2. Ejemplo de aminoácido con cadena lateral chica:



3. Giro en torno a los ángulos ϕ/ψ de un residuo seleccionado:



4. Puentes de hidrógeno entre hojas de una lámina beta:



5. Residuo hidrofóbico expuesto:

Pull Mode

Score: 5319 of 7847

4-1: Hide the Hydrophobic

Repeat guide?
OK!




Save a png image of your protein to the desktop.
Hotkey: Ctrl+H

Puzzle Menu General Options Save Solution Open/Share Solutions Save Screenshot Save and Exit

► Actions ► Undo ▲ Menu

► Chat - Global ⓘ ✕ auto show

Residuo hidrofóbico enterrado:

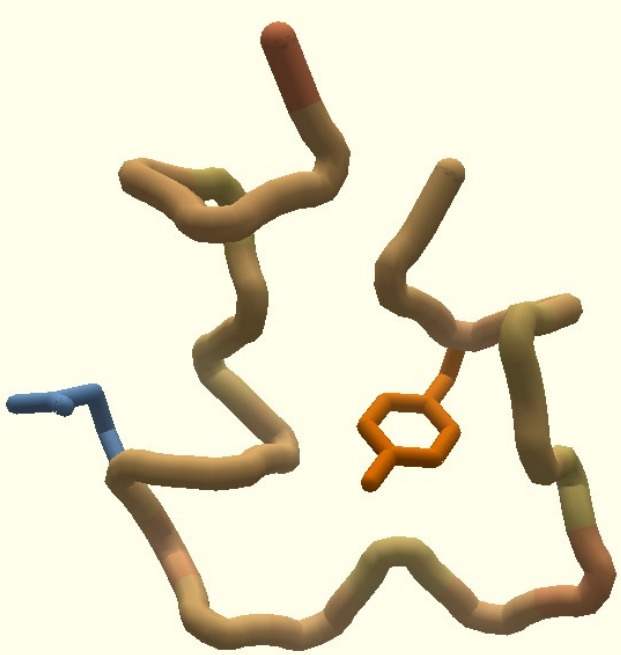
 Pull Mode

Score:

7852

 of 7847


4-1: Hide the Hydrophobic





You have completed
13 of 31 intro puzzles!


Moves: 3
Time: 0:31


Next is: 4-2: Turn It Down!


 Next Puzzle


 Puzzle Menu


 Replay Puzzle


 Puzzle Menu

 General Options

 Save Solution

 Open/Share Solutions

 Save Screenshot



 Save and Exit

► Actions

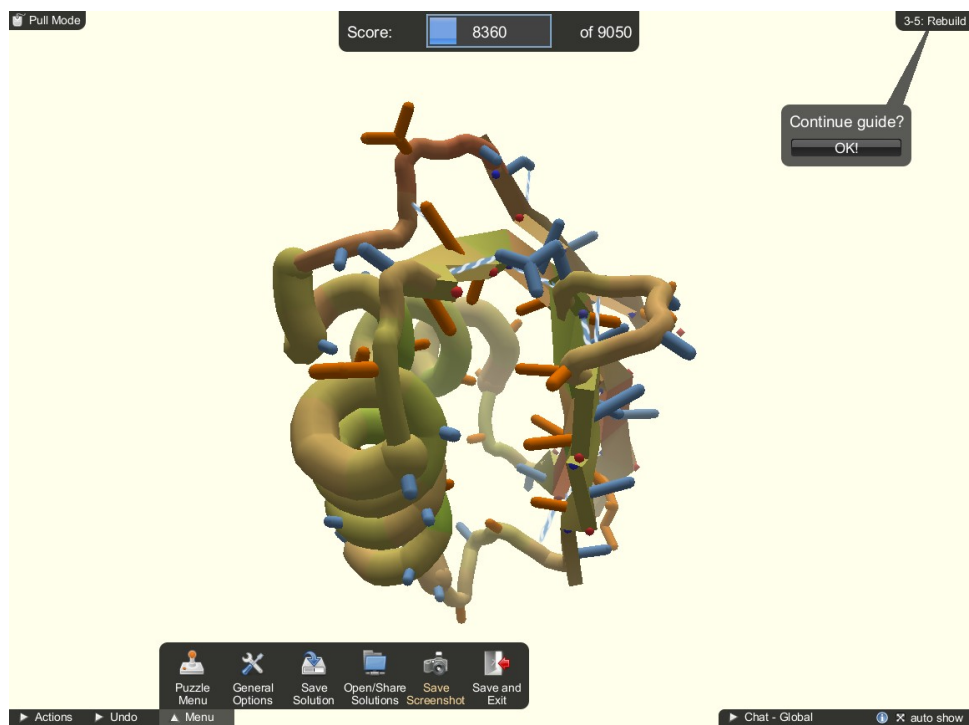
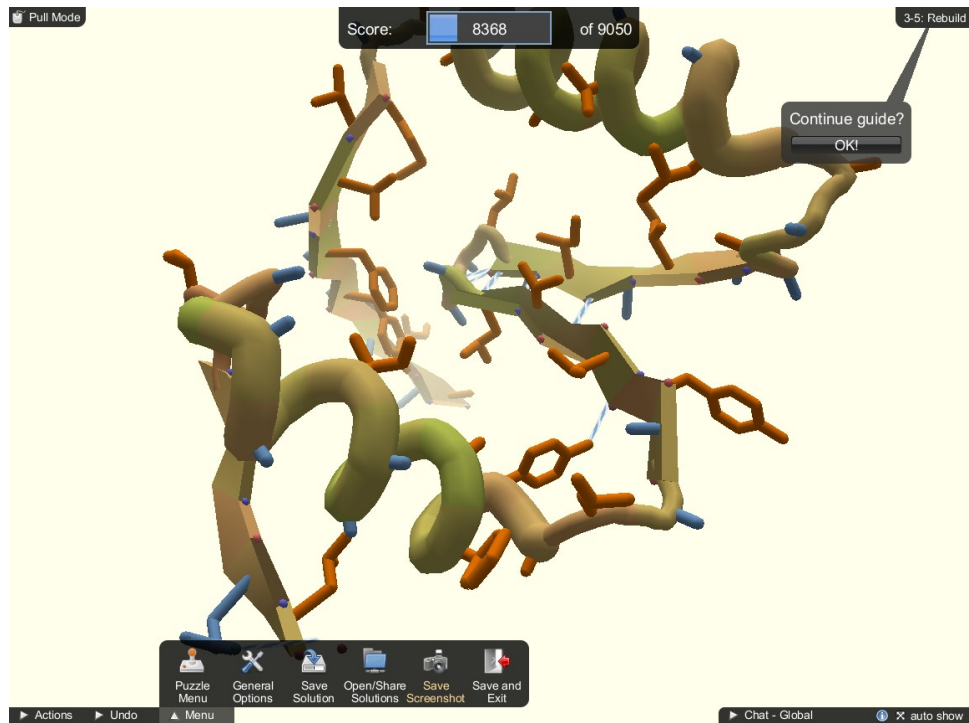
► Undo

▲ Menu

Send

▲ Chat - Global   auto show

6. Conformaciones distintas con puntuaciones similares:



7. Tiempo que llevaría explorar todas las conformaciones posibles de uno de los péptidos o proteínas que utilicen en los puzzles:

De acuerdo con Cyrus Levinthal, el tiempo que tarda recorrer todas las conformaciones de una proteína depende del número de aminoácidos que tenga, las conformaciones que estos puedan adoptar y lo que cada cambio de estado tarda en medio fisiológico.

Entonces para una proteína de 50 aminoácidos, tomando como tiempo de cambio de estado el dado en clase de 10^{-13} s, y las 10 distintas conformaciones posibles :

$$T_{\text{expl}} = 10^{-13} \cdot 10^{50} = 10^{37} \text{s}$$