

Máster Universitario en Bioinformática

Proteómica y Bioinformática Estructural

Curso académico 2024-2025



Universidad
Internacional
de Valencia

Dra. Magdalena Nikolaeva Koleva

magdalena.nikolaeva@professor.universidadviu.com

03/10/2024

De:



Planeta Formación y Universidades

Sesión 6

Modelado estructural de proteínas

Actividad Práctica 1.4



viu

Universidad
Internacional
de Valencia

03/10/2024

De:



Planeta Formación y Universidades

¿Qué vimos en la sesión anterior?

Modelado de proteínas

Cuando existe una proteína homóloga

Por homología

Cuando es imposible encontrar un homólogo

Por reconocimiento del plegamiento

Ab initio

1. *Threading* (enhebrado)

a) Evaluación con potenciales estadísticos
(cálculo de energías)

2. Homología remota

3. Predicción de estructura secundaria

1. Basados en principios físicos

a) Termodinámica, mecánica clásica (*bonded, non-bonded*)

i. Monte-Carlo

A. *Steepest Descent*

B. *Conjugate Gradient*

C. *Simulated annealing*

ii. Dinámica molecular

2. Basados en principios empíricos (probabilidad)

1. Búsqueda de molde (alineamiento de secuencia)

2. Construcción del modelo

a) Construcción de cadena principal

i. Ensamblado de cuerpo rígido

ii. Conforme restricciones espaciales

b) Construcción de cadenas laterales

i. Librerías de rotámeros



viu

Universidad
Internacional
de Valencia

universidadviu.com

De:
 Planeta Formación y Universidades