

Plantilla de Respuestas

Actividad Práctica 1

Apartado	Respuesta
AP1.1	Bases de datos (2 puntos)
1A	Aparecen 6 tipos distintos de neurotoxinas diferentes tras la optimización de la búsqueda, que son: neurotoxina botulínica A, B, E, F, G y X.
1B	Entry: Neurotoxina botulínica A: P0DPI0 Neurotoxina botulínica B: P10844 Neurotoxina botulínica E: Q00496 Neurotoxina botulínica F: P30996 Neurotoxina botulínica G: Q60393 Neurotoxina botulínica X: P0DPK1
1C	Longitud de secuencia: Neurotoxina botulínica A: 1,296 AA Neurotoxina botulínica B: 1,291 AA Neurotoxina botulínica E: 1,251 AA Neurotoxina botulínica F: 1,274 AA Neurotoxina botulínica G: 1,297 AA Neurotoxina botulínica X: 1,306 AA
1D	Sube el archivo AP1.1-1a_bot_tox.fasta
2A	Existen entradas de la miosina 5 para la cepa de <i>Saccharomyces cerevisiae</i> ATCC 204508/S288c y la cepa YJM789
2B	Longitud de las secuencias de miosina es 1,219 AA.
2C	El nombre del gen de la miosina 5 es MYO5.
2D	La localización subcelular es formando parte del citoesqueleto en el citoplasma, ensamblada con la actina.
2E	Las <i>keywords</i> , <i>Go annotations</i> son: Actin-binding, Hydrolase, Motor protein, Myosin, ATP-binding, Nucleotide-binding.
2F	Las 5 modificaciones son fosforilaciones, 4 de ellas en residuos de serina cuyos números de residuo son: 357, 777, 992, 1205. Y una fosforilación en residuos de tirosina, en el residuo 359.

3	En cuanto a similitud de secuencia, se forman dos parejas: una pareja formada por la neurotoxina F y la E y la otra pareja formada por la neurotoxina B y la G.
	Sube el archivo AP1.1-3_multiple_align.fasta
4A	<p>La cita primaria en la que se describe 1ABO es “High-resolution crystal structures of tyrosine kinase SH3 domains complexed with proline-rich peptides” (doi: https://doi.org/10.1038/nsb0894-546)</p> <p>La cita primaria en la que se describe 1BBZ “Crystal structure of the abl-SH3 domain complexed with a designed high-affinity peptide ligand: implications for SH3-ligand interactions” (doi: https://doi.org/10.1006/jmbi.1998.1932)</p> <p>La cita primaria en la que se describe 1FYN es “High-resolution crystal structures of tyrosine kinase SH3 domains complexed with proline-rich peptides” (doi: https://doi.org/10.1038/nsb0894-546)</p> <p>La cita primaria en la que se describe 1V1C es “Solution Structure of the SH3 domain of Obscurin” (doi: https://doi.org/10.2210/pdb1v1c/pdb)</p>
4B	<p>1ABO ha sido resuelta mediante difracción de rayos X con una resolución de 2.00 Å.</p> <p>1BBZ ha sido resuelta mediante difracción de rayos X con una resolución 1.65 Å.</p> <p>1FYN ha sido resuelta mediante difracción de rayos X con una 2.30 Å.</p> <p>1V1C ha sido resuelta mediante espectroscopía de resonancia nuclear (solution NMR).</p>
4C	El organismo del que proviene 1ABO es de <i>Mus musculus</i> . El resto de estructuras provienen de <i>Homo sapiens</i> .
4D	<p>Todas las estructuras están compuestas por una macromolécula.</p> <p>1ABO y 1BBZ representan ambas una proteína tirosina-kinasa ABL</p> <p>1FYN representa una proteína fosfotransferasa.</p> <p>1V1C representa la proteína obscurina.</p>
4E	Todas representan el dominio SH3 de la proteína.
AP1.2	Chimera I (2 puntos)
1ABC	Sube el archivo AP1.2-1_1ECD.png
1D	
AP1.3	Chimera II (2 puntos)
1B	<p>El RMSD en de la cadena A de 1TAD con 1R2Q es de: 1.024 angstroms</p> <p>El RMSD en de la cadena A de 1TAD con 121P es de: 1.241 angstroms</p> <p>El RMSD en de la cadena A de 1TAD con 1J2J es de: 1.079 angstroms</p>
1C	Sube el archivo AP1.3-1c_sec_align.fasta

1D	Sube el archivo AP1.3-1d_scene.png
AP1.4	Modelado por homología (4 puntos)
1A	No, no existen estructuras 3D de la proteína resueltas experimentalmente.
1B	Sí, de <i>Mus musculus</i> y de <i>Homo sapiens</i> .
1D	Las referencias que usa como mejores moldes para el modelo por homología son: Q9NYG8.1.A con un GMQE de 0.73 y obtenida por predicción con AlphaFold, y 4i9w.1.B con un GMQE de 0.57 y obtenida por cristalografía de rayos X, con una resolución de 2.8 Å.
1E	No, la cobertura no es completa en ninguno de los casos. En el modelo 4i9w.1.B parece faltar la región final de la secuencia, y en ambos modelos falta un fragmento del inicio de la secuencia.
1F	La región final que no está resuelta en 4i9w.1.B podría ser la región intracelular de la proteína, mientras que la región que falta en ambos modelos podría ser una región que interactúe con otras proteínas o los complejos de membrana y adopte esa estructura estable solo cuando aparece la interacción, por lo que sería más difícil de predecir. También podría ser una región muy variable, poco conservada evolutivamente y al ser especies distintas sea más difícil su predicción.
1G	Sube los archivos AP1.4-1_model_1.pdb y AP1.4-1_model_2.pdb
1H	Sube el archivo AP1.4-1_homodimer.png