

Sesión 1 – Parte II

Introducción a la proteómica



Universitat
Internacional
de València

Temario - Contenidos

Tema 1. Introducción a la proteómica

- 1.1. Química de proteínas: aspectos básicos
- 1.2. De la química de proteínas a la proteómica
- 1.3. Información proteómica: aplicaciones
- 1.4. Metodologías usadas en proteómica
- 1.5. Bioinformática y proteómica

Temario - Contenidos

Tema 1. Introducción a la proteómica

1.1. Química de proteínas: aspectos básicos

1.2. De la química de proteínas a la proteómica

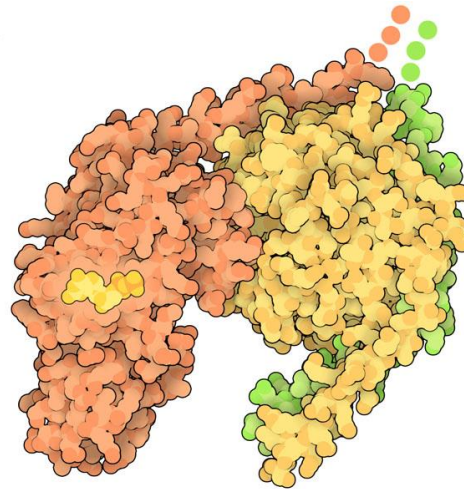
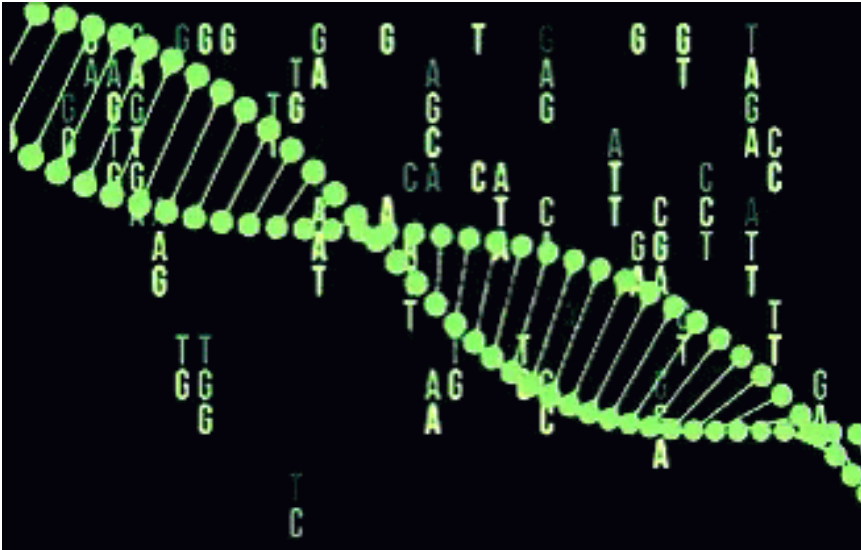
1.3. Información proteómica: aplicaciones

1.4. Metodologías usadas en proteómica

1.5. Bioinformática y proteómica

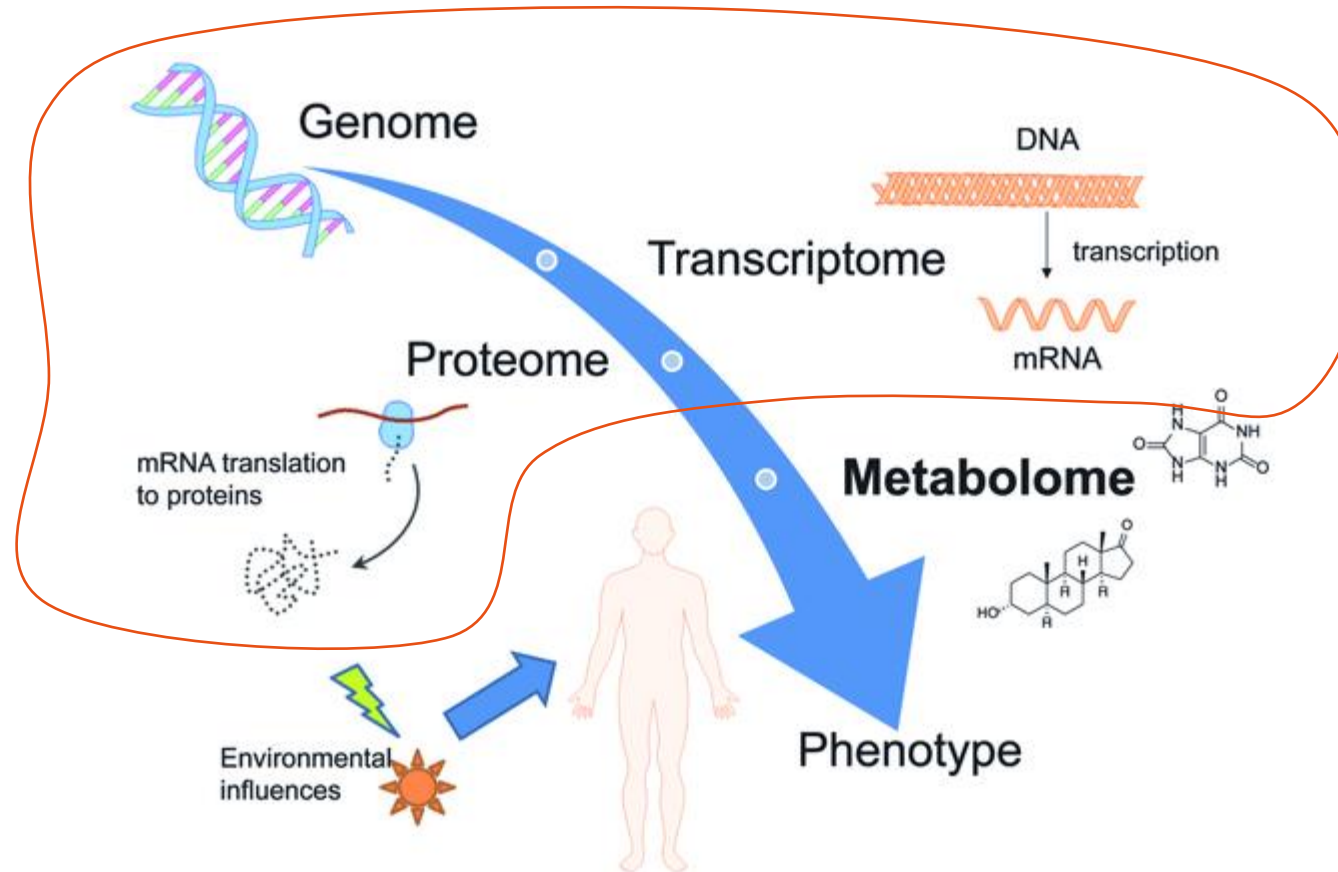
1.1. Química de proteínas: aspectos básicos

Genotipo vs Fenotipo:



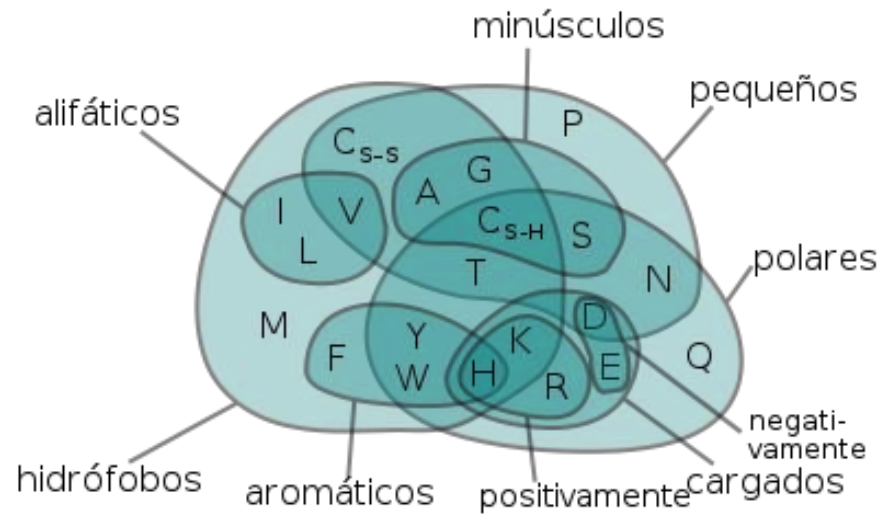
1.1. Química de proteínas: aspectos básicos

Ciencias ómicas

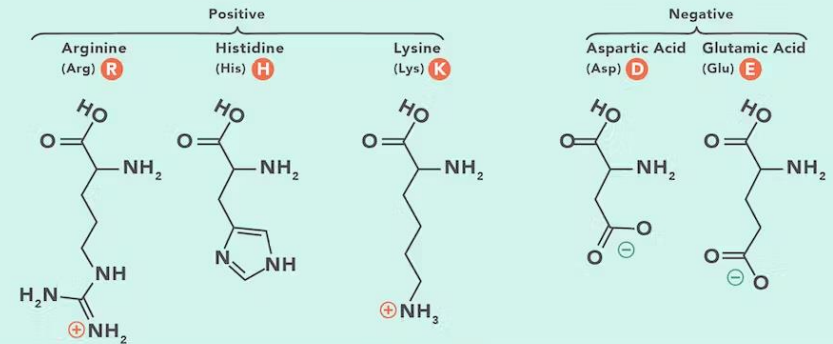


1.1. Química de proteínas: aspectos básicos

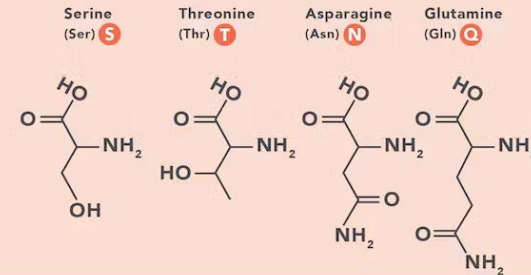
Aminoácidos: unidades básicas de las proteínas



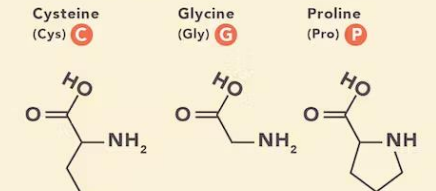
A. Amino Acids with Electrically Charged Side Chains



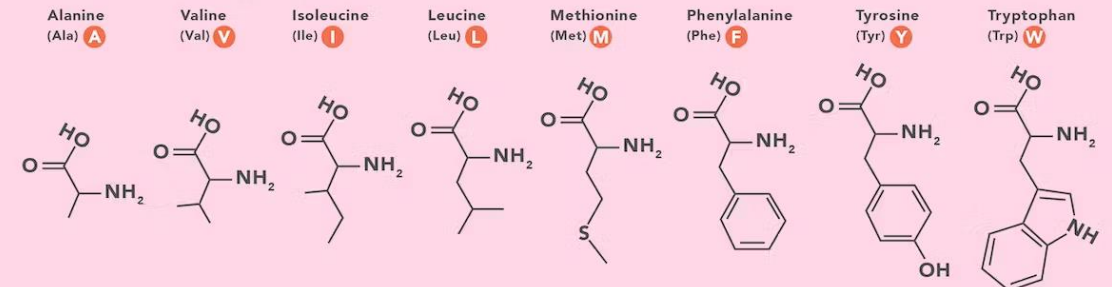
B. Amino Acids with Polar Uncharged Side Chains



C. Special Cases

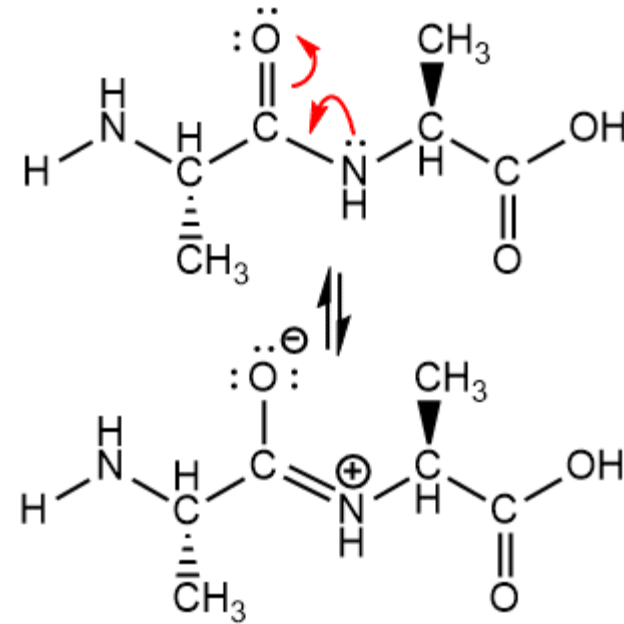
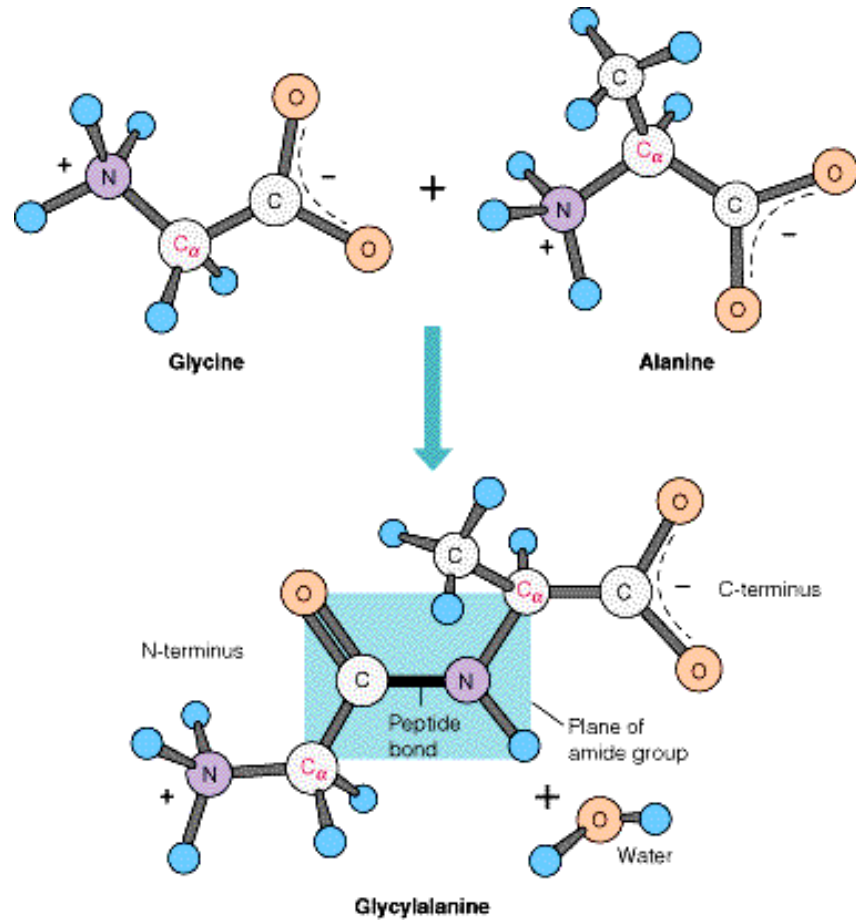


D. Amino Acids with Hydrophobic Side Chains



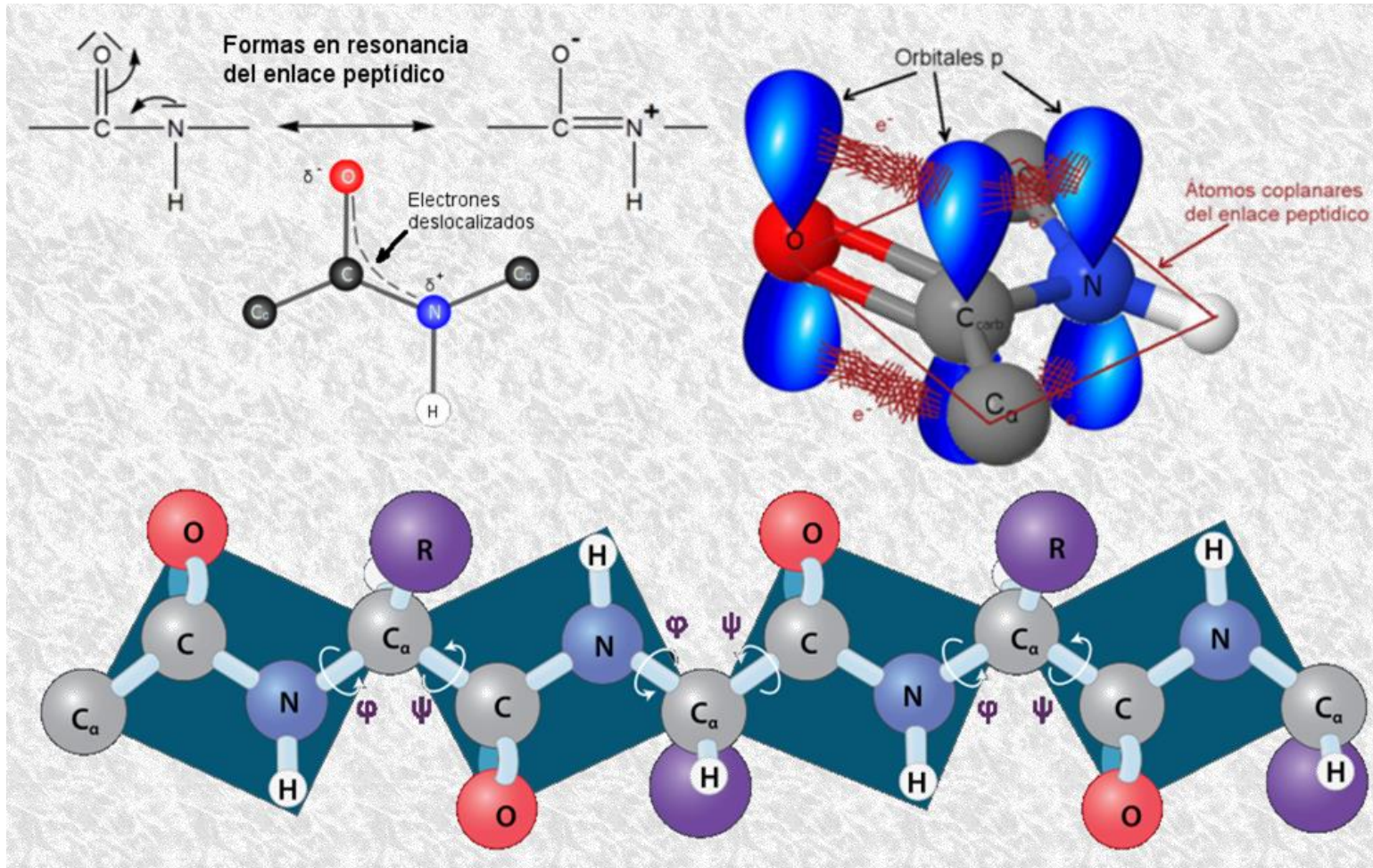
1.1. Química de proteínas: aspectos básicos

El enlace peptídico



1.1. Química de proteínas: aspectos básicos

El enlace peptídico

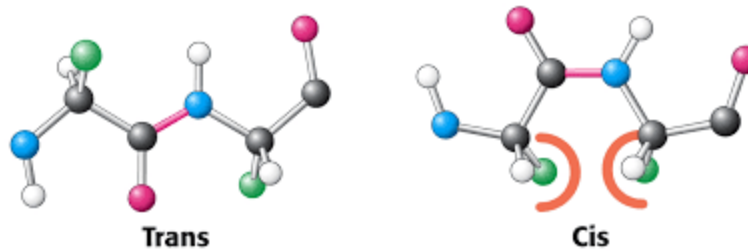


1.1. Química de proteínas: aspectos básicos

Cadena polipeptídica:

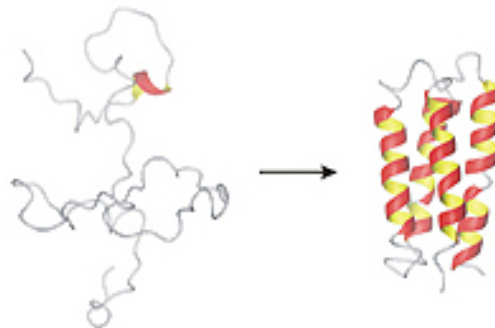
Presenta flexibilidad lo que le permite adoptar **diferentes conformaciones**, aunque con **ciertas restricciones**:

- Planaridad del enlace peptídico
- Choques estéricos de cadenas laterales



Plegamiento proteico: conformación global estable (3D) esencial para su **función**

Desplegada:
Sin función



Plegada:
Con función

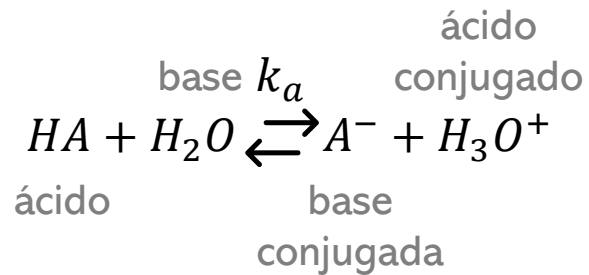
1.1. Química de proteínas: aspectos básicos

Equilibrio ácido-base

pKa - es el pH en el que se habrá disociado el 50% del ácido

pKb - es el pH en el que se habrá asociado el 50% de la base

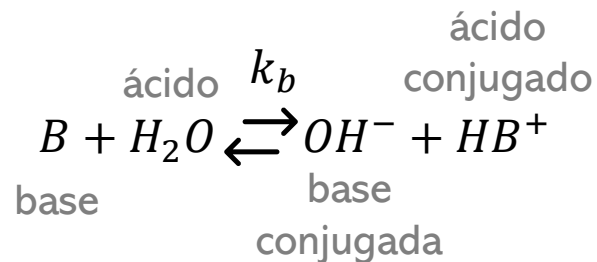
pl (punto isoelectrico) - es el pH en el que la suma de las cargas presentes en una molécula es nula.



$$k = \frac{[A^-][H_3O^+]}{[HA][H_2O]}$$

$$k[H_2O] = \frac{[A^-][H_3O^+]}{[HA]}$$

$$pH = pK_a + \log \frac{[A^-]}{[HA]}$$



$$k = \frac{[OH^-][HB^+]}{[B][H_2O]}$$

$$k[H_2O] = \frac{[OH^-][HB^+]}{[B]}$$


$$pOH = pK_b + \log \frac{[B]}{[HB^+]}$$


1.1. Química de proteínas: aspectos básicos

Equilibrio ácido-base

La carga neta de un péptido o proteína depende de la combinación de valores de pK_a de sus aminoácidos.

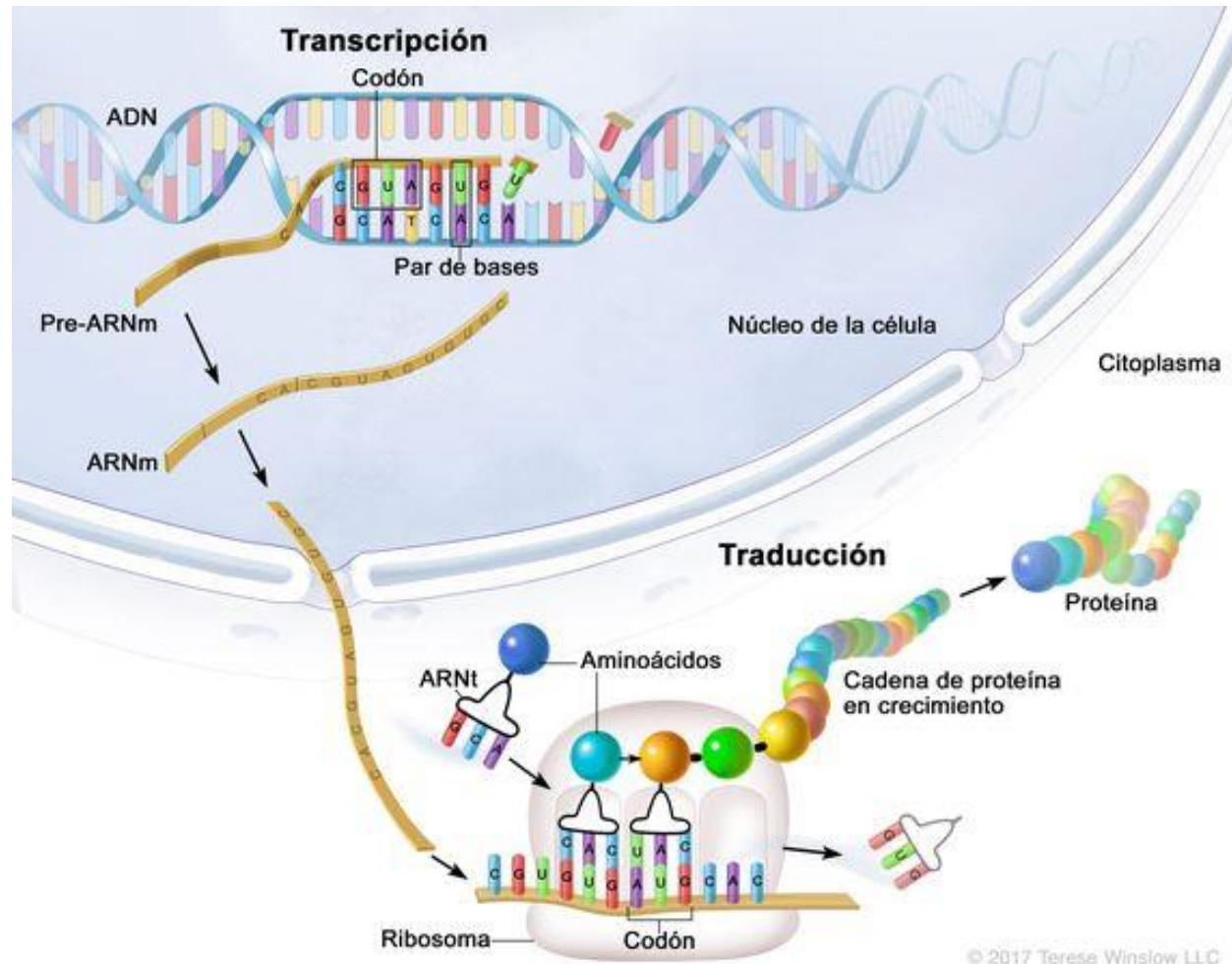
Aminoácido	Tipo	Abreviatura	Letra	pK_{a1} (-COOH)	pK_{a2} (-NH ₂)	pK_{aR} (R)	pI
Glicina	Neutros apolares	GLI	G	2,34	9,78		6,06
Alanina		ALA	A	2,35	9,69		6,02
Valina		VAL	V	2,32	9,62		5,97
Leucina		LEU	L	2,36	9,64		6,00
Isoleucina		ILE	I	2,36	9,68		6,02
Metionina		MET	M	2,28	9,21		5,75
Prolina		PRO	P	1,99	10,60		6,30
Fenilalanina	Neutros aromáticos	PHE	F	1,83	9,29		5,53
Tirosina		TRY	Y	2,20	9,11	10,07	5,65
Triptófano		TRP	W	2,38	9,39		5,89
Serina	Neutros polares	SER	S	2,21	9,15		5,68
Cisteína		CYS	C	1,96	10,28	8,18	5,07
Treonina		TRE	T	2,71	9,62		6,16
Asparagina		ASG	N	2,02	8,80		5,41
Glutamina		GLN	Q	2,17	9,13		5,65
Ácido aspártico	Ácidos	ASP	D	2,09	9,82	3,86	2,97
Ácido glutámico		GLU	E	2,19	9,67	4,25	3,22
Lisina	Básicos	LYS	K	2,18	8,95	10,53	9,74
Arginina		ARG	R	2,17	9,04	12,48	10,76
Histidina		HIS	H	1,82	9,17	6,00	7,58

si $pH < pI$ 

si $pH > pI$ 

1.1. Química de proteínas: aspectos básicos

Expresión y síntesis de proteínas



	U		C		A		G	
U	UUU	Phe	UCU	Ser	UAU	Tyr	UGU	Cys
	UUC	Phe	UCC	Ser	UAC	Tyr	UGC	Cys
	UUA	Leu	UCA	Ser	UAA	STOP	UGA	STOP
	UUG	Leu	UCG	Ser	UAG	STOP	UGG	Try
C	CUU	Leu	CCU	Pro	CAU	His	CGU	Arg
	CUC	Leu	CCC	Pro	CAC	His	CGC	Arg
	CUA	Leu	CCA	Pro	CAA	Gln	CGA	Arg
	CUG	Leu	CCG	Pro	CAG	Gln	CGG	Arg
A	AUU	Iso	ACU	Thr	AAU	Asn	AGU	Ser
	AUC	Iso	ACC	Thr	AAC	Asn	AGC	Ser
	AUA	Iso	ACA	Thr	AAA	Lys	AGA	Arg
	AUG	Met	ACG	Thr	AAG	Lys	AGG	Arg
G	GUU	Val	GCU	Ala	GAU	Asp	GGU	Gly
	GUC	Val	GCC	Ala	GAC	Asp	GGC	Gly
	GUA	Val	GCA	Ala	GAA	Glu	GGA	Gly
	GUG	Val	GCG	Ala	GAG	Glu	GGG	Gly

©BIOINNOVA
innovabiologia.com

© 2017 Terese Winslow LLC
U.S. Govt. has certain rights

1.1. Química de proteínas: aspectos básicos

Niveles de organización estructural proteica:

Estructura **primaria**

- Secuencia de amino ácidos

Estructura **secundaria**

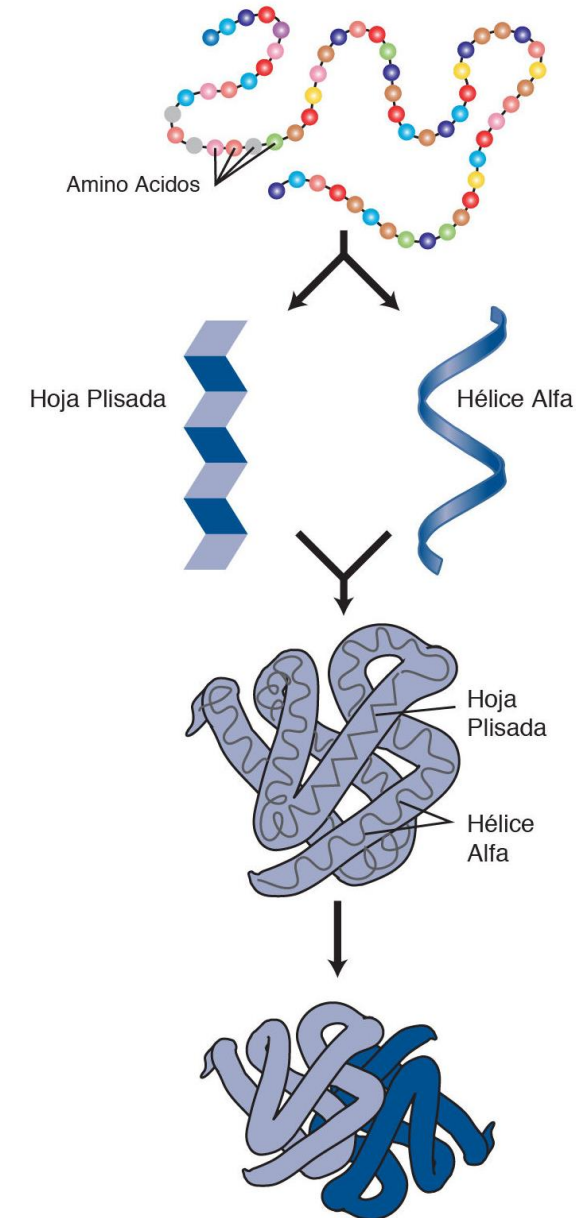
- **Plegamiento** de la cadena polipeptídica debido a formación de puentes de hidrógeno

Estructura **terciaria**

- Plegamiento final e interacción entre estructuras secundarias, formación de dominios

Estructura **cuaternaria**

- Interacción entre dominios



1.1. Química de proteínas: aspectos básicos

Modificaciones postraduccionales

Las proteínas sufren modificaciones químicas en sus residuos lo que regula su función.

- Dependencia del sistema de expresión de proteínas recombinantes (bacterias, levaduras, células de insectos y mamíferos).

Modificaciones postraduccionales	Residuos principalmente afectados
Fosforilación	Ser, Thr, Tyr
Glicosilación	Asp, Ser, Thr, Trp
Acetilación	Lys
Amidación	Asn, Gln
Hidroxilación	Lys, Pro
Metilación	Lys, Arg, His, Ala, Asp, Cys
Ubiquitinación	Lys
Nitrosilación	Cys

Temario - Contenidos

Tema 1. Introducción a la proteómica

1.1. Química de proteínas: aspectos básicos

1.2. De la química de proteínas a la proteómica

1.3. Información proteómica: aplicaciones

1.4. Metodologías usadas en proteómica

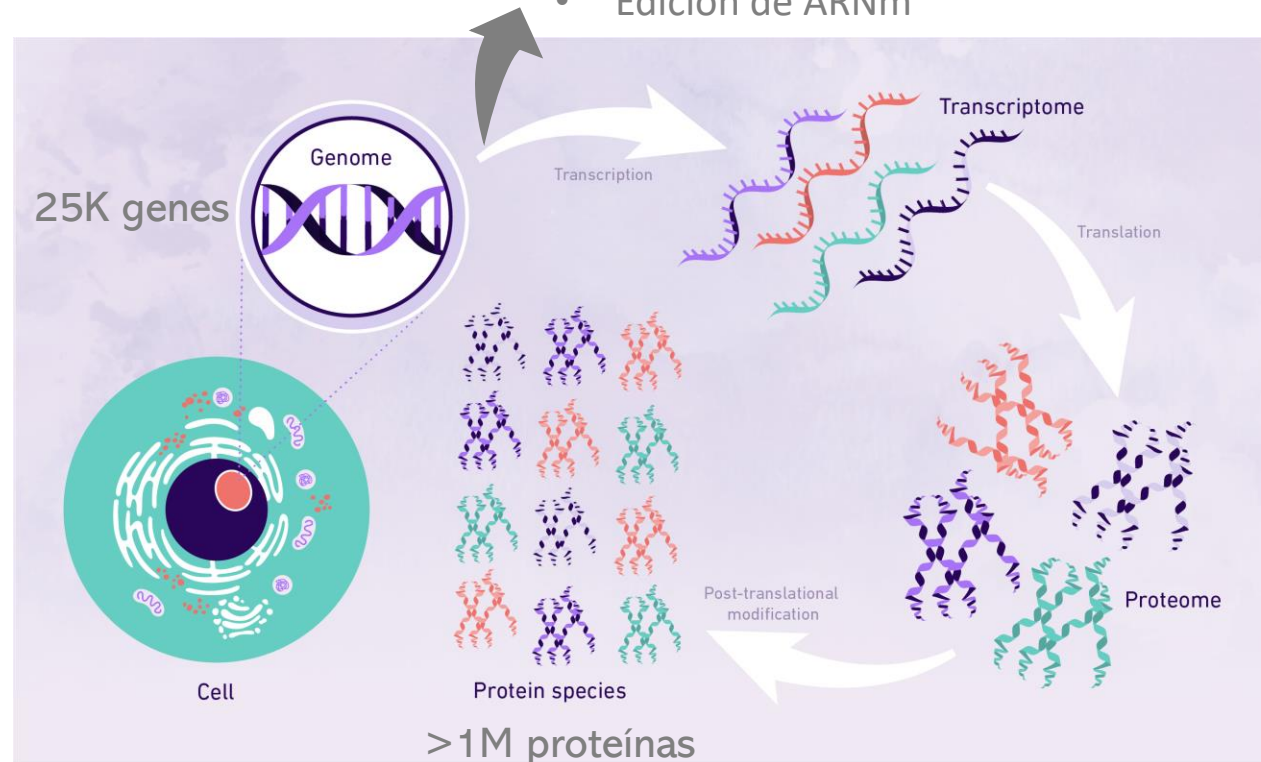
1.5. Bioinformática y proteómica

1.2. De la química de proteínas a la proteómica

Un genoma, múltiples proteomas

La **proteómica** estudia a gran escala el conjunto de proteínas de una célula, tejido u organismo (**proteoma**).

- Promotores alternativos
- *Splicing* alternativo
- Edición de ARNm

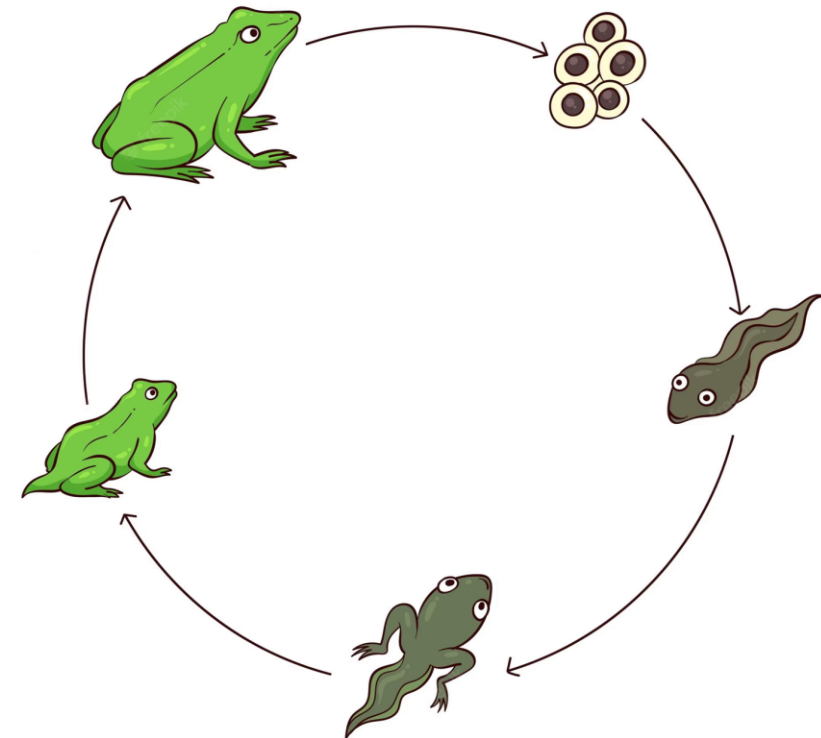
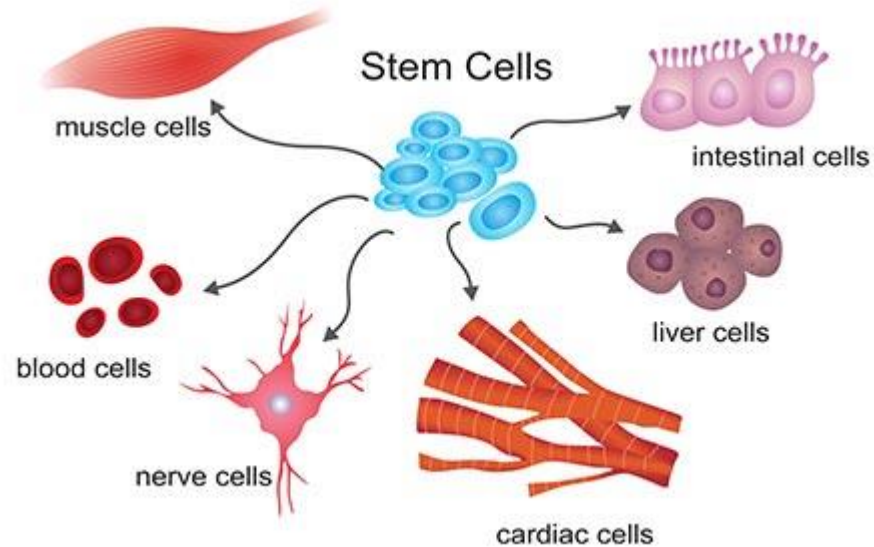


1.2. De la química de proteínas a la proteómica

Un genoma, múltiples proteomas

Dentro de un mismo organismo, el proteoma de una célula es distinto al de otra.

El proteoma de una misma célula cambia con el tiempo debido a sus procesos celulares (diferenciación, senescencia, mutaciones espontáneas ...). Consecuentemente, el proteoma de un mismo individuo cambia con el tiempo.



Temario - Contenidos

Tema 1. Introducción a la proteómica

1.1. Química de proteínas: aspectos básicos

1.2. De la química de proteínas a la proteómica

1.3. Información proteómica: aplicaciones

1.4. Metodologías usadas en proteómica

1.5. Bioinformática y proteómica

1.3. Proteómica - aplicaciones

Estudio del **mecanismo molecular de procesos biológicos** fundamentales

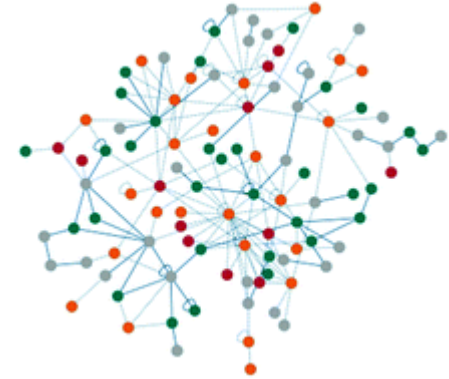
- Estructuras subcelulares, orgánulos, señalización

Estudio de **estructura y función de proteínas**

- Interacción y asociación entre proteínas (**interactómica**)

Proteómica diferencial

- **Clínica**: descubrimiento de biomarcadores (comparación entre individuos sanos y enfermos)
- **Nutrición (nutriproteómica)**: influencias ambientales (alimentación, estrés, xenobióticos) sobre la expresión de genes y regulación de la función de proteínas.
- **Farmacología (farmacoproteómica)**: efectos de fármacos y compuestos tóxicos.
 - Impulso en el diseño de nuevos fármacos
 - Mejor conocimiento del modo de acción
 - Esclarecimiento del mecanismo de enfermedades
- **Evolución**: comparación de estirpes y especies (relaciones evolutivas). Mejor que la genómica (p.ej. 98.7% de homología genómica entre hombre y chimpancé, pero 40% de diferencia en el perfil proteómico).

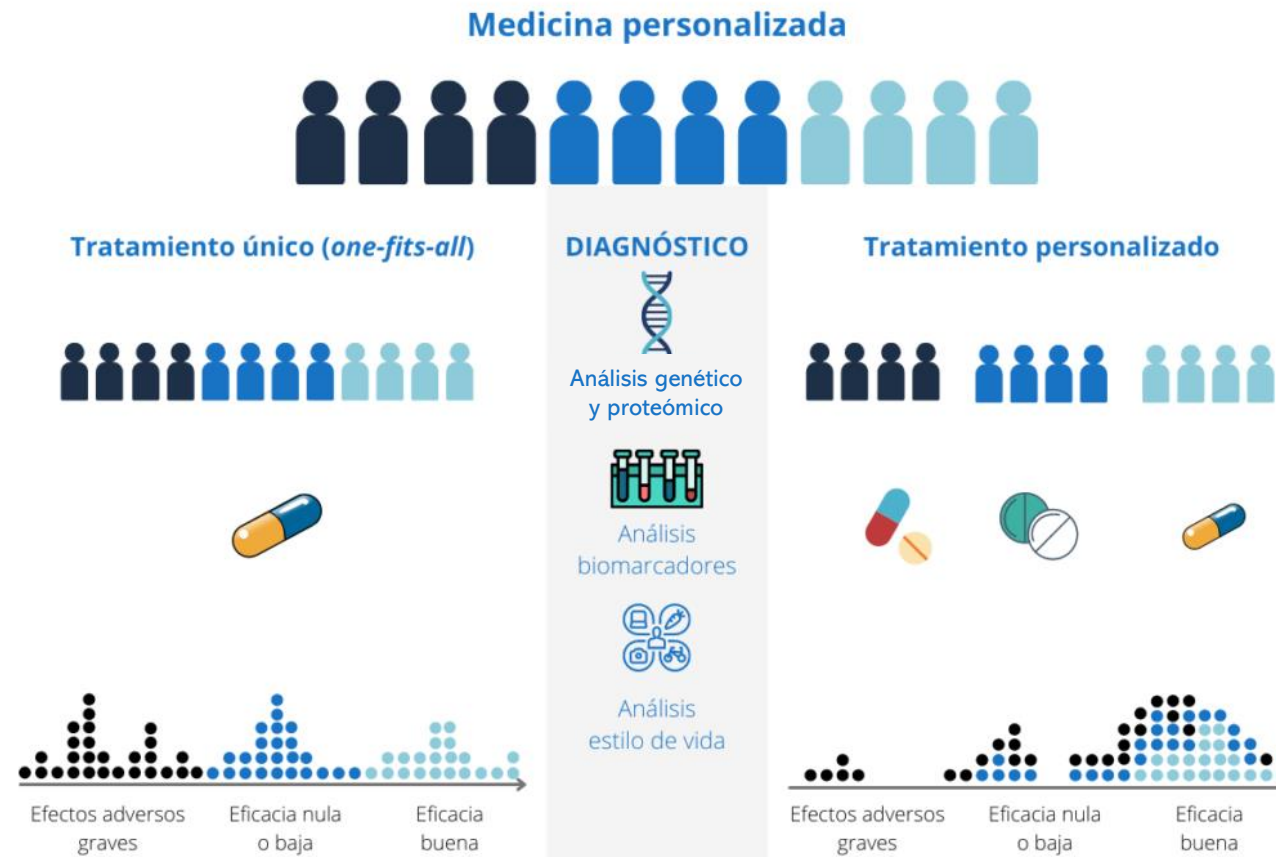


1.3. Proteómica - aplicaciones

Aplicaciones biomédicas:

- Clínica - Diagnóstico y clasificación
- Farmacológica - Respuesta terapéutica

> Medicina personalizada



Temario - Contenidos

Tema 1. Introducción a la proteómica

1.1. Química de proteínas: aspectos básicos

1.2. De la química de proteínas a la proteómica

1.3. Información proteómica: aplicaciones

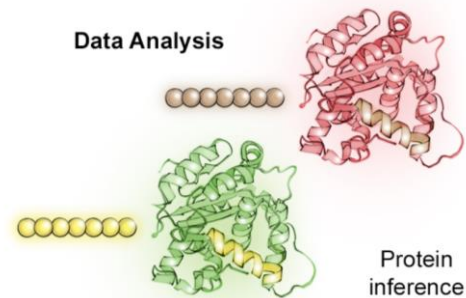
1.4. Metodologías usadas en proteómica

1.5. Bioinformática y proteómica

1.4. Proteómica - metodologías

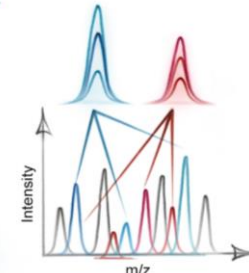
Caracterización de la expresión de proteínas:

1. Extracción, separación y purificación de las muestras
 - Precipitación
 - Centrifugación
 - Filtración
 - Cromatografía
 - Electroforesis
2. Digestión proteolítica
3. Espectrometría de masas (MS) y HPLC
4. Búsqueda en bases de datos para identificación

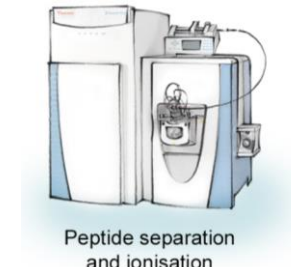


4

Identificación peptídica y cuantificación



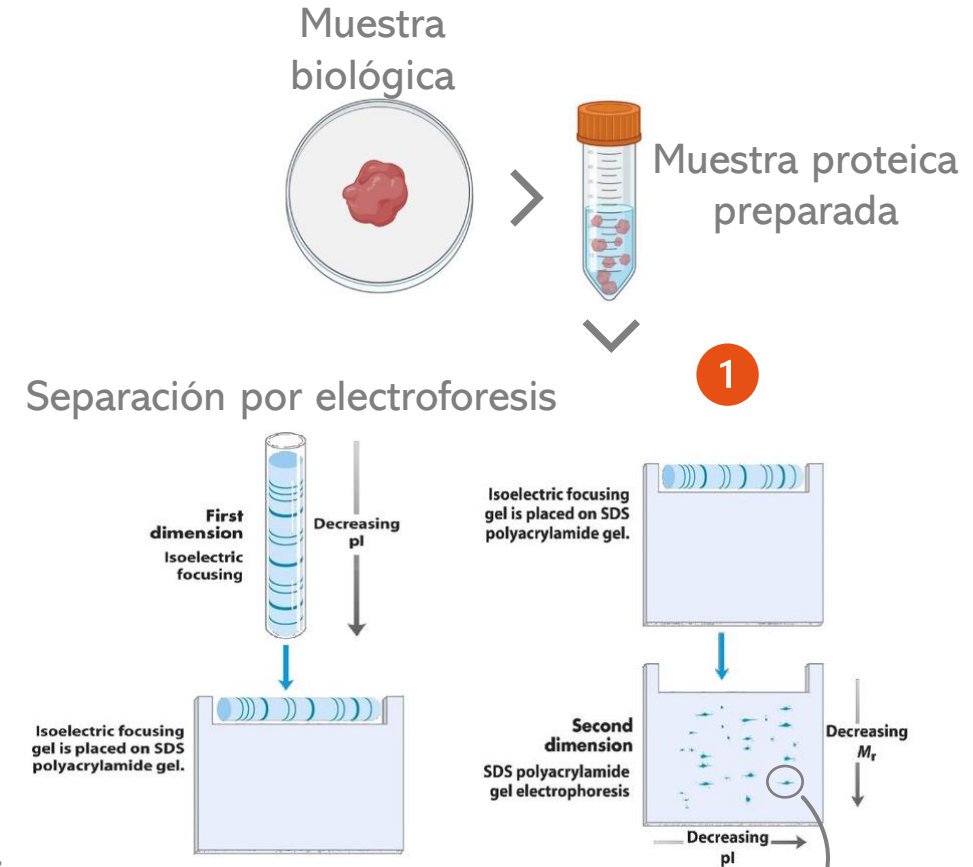
Espectrometría de masas



3

Digestión proteolítica

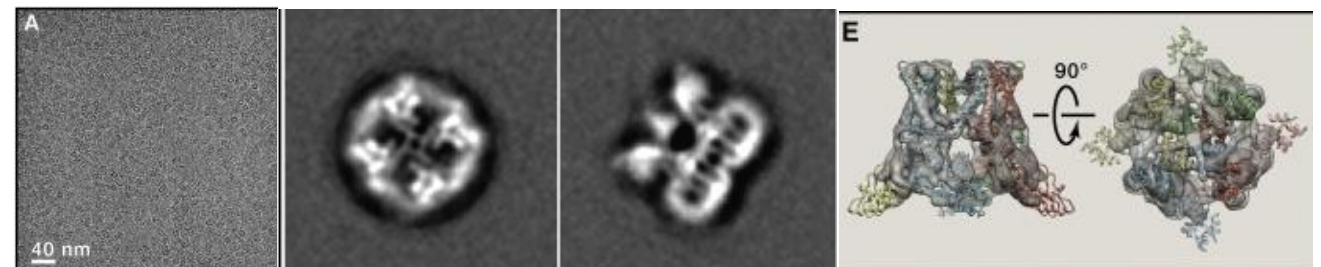
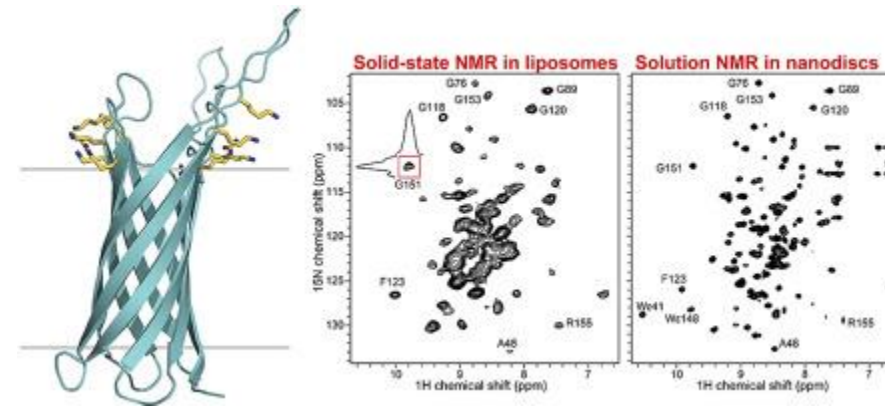
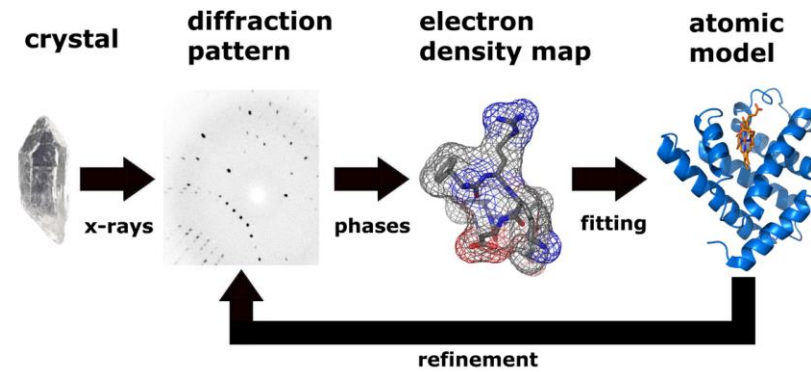
2



1.4. Proteómica - metodologías

Proteómica estructural:

- Cristalografía de rayos X
- Resonancia magnética nuclear (NMR)
- Crio-electromicroscopía



1.4. Proteómica - metodologías

Proteómica funcional y de alto rendimiento:

Microarrays clásicos

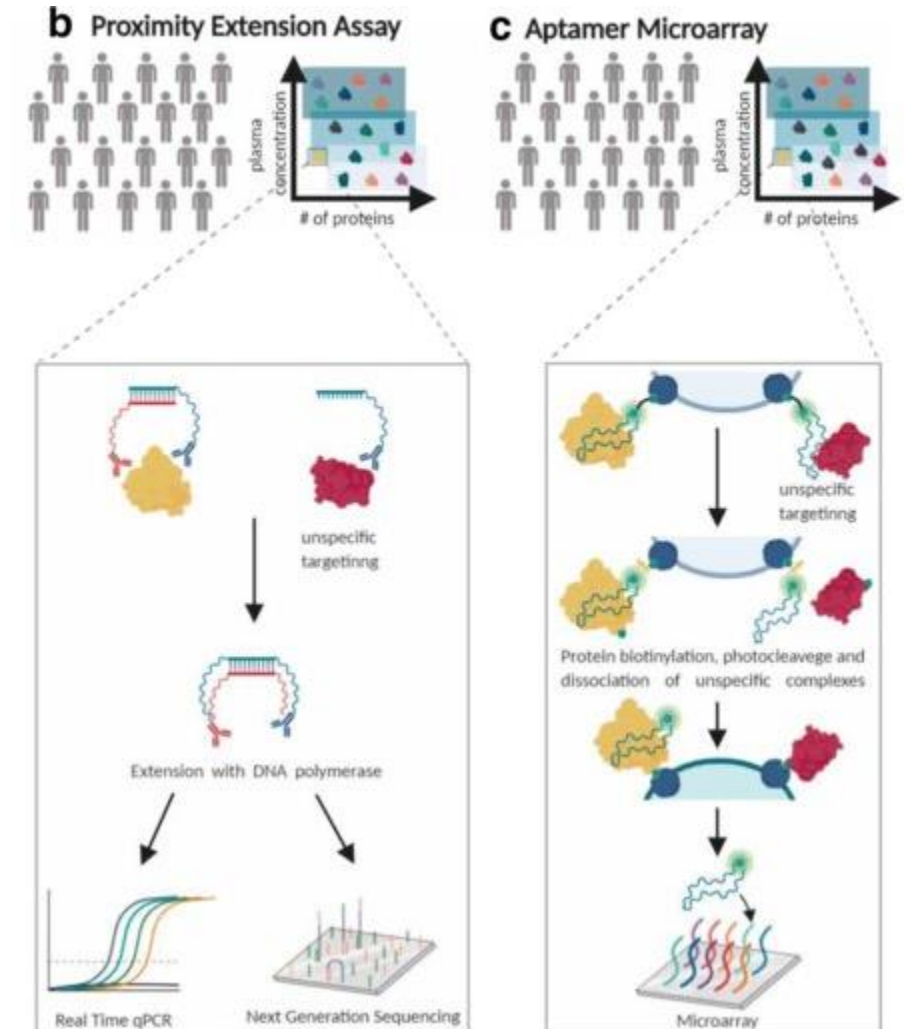
- ELISA – analíticos
- Actividad enzimática - funcionales

○ Proximity Extension Assay (PEA)

Reconocimiento proteico mediante **duo de anticuerpos policlonales unidos a oligonucleótidos complementarios**. Al unirse a la proteína diana los dos oligonucleótidos hibridan posibilitando su amplificación y cuantificación mediante qPCR/NGS.

○ Aptamer Microarray (AM)

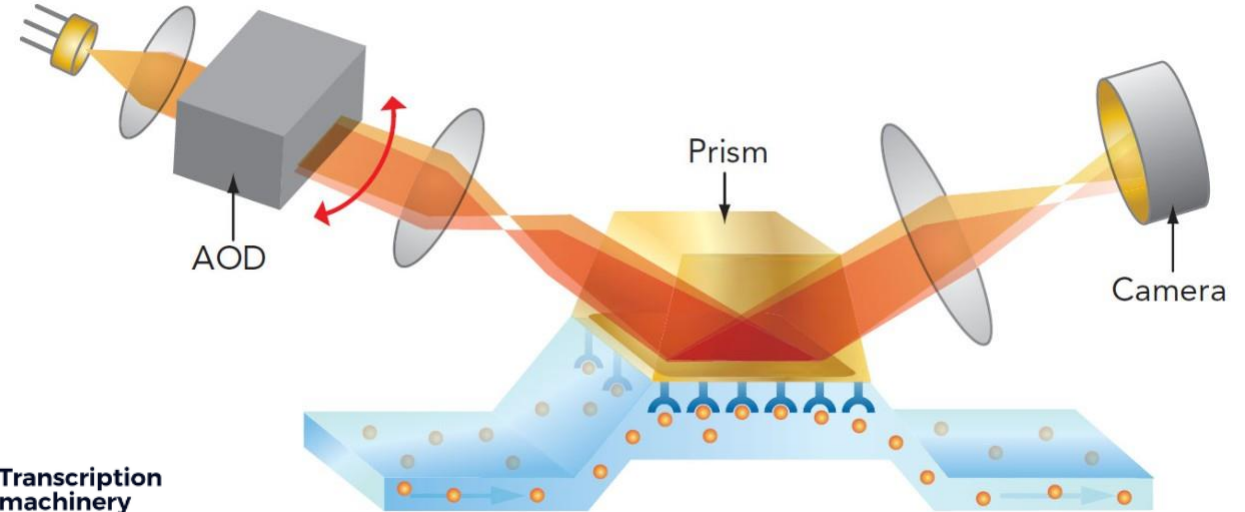
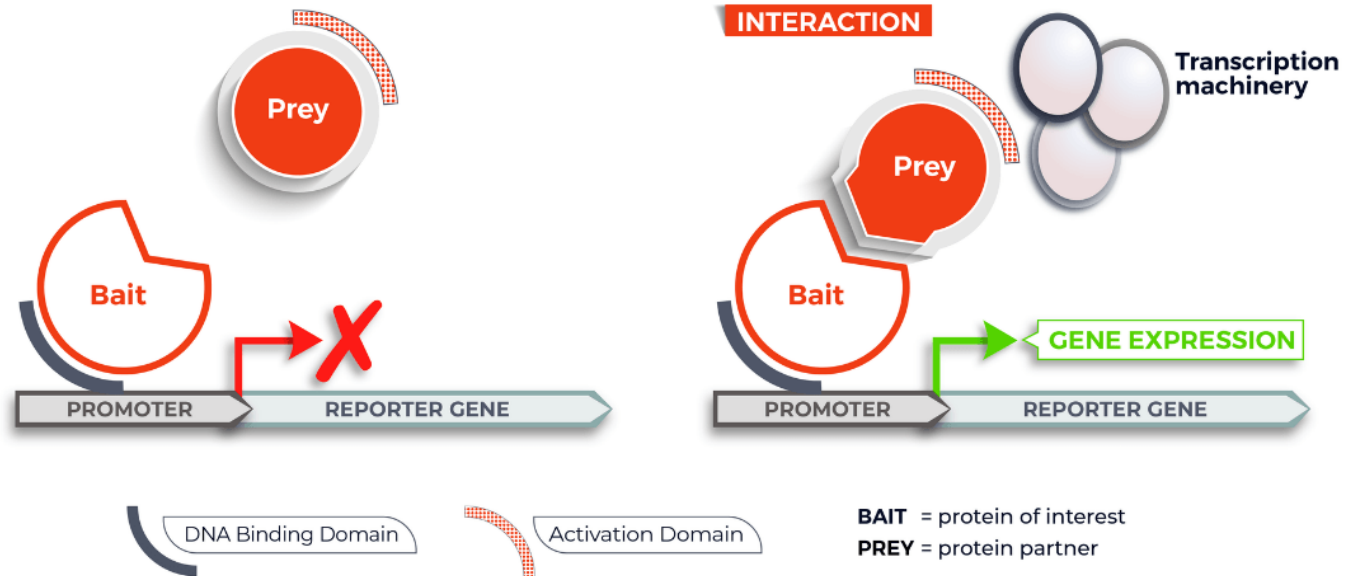
Emplea oligonucleótidos de cadena simple que se pliegan adoptando conformaciones (**aptámero**) que interaccionan con proteínas de interés parecido a un anticuerpo. Cuantificación por fluorescencia (similar a microarray DNA/RNA).



1.4. Proteómica - metodologías

Proteómica funcional (interactómica):

- Resonancia de plasmón de superficie
- Y2H



Temario - Contenidos

Tema 1. Introducción a la proteómica

1.1. Química de proteínas: aspectos básicos

1.2. De la química de proteínas a la proteómica

1.3. Información proteómica: aplicaciones

1.4. Metodologías usadas en proteómica

1.5. Bioinformática y proteómica

1.5. Bioinformática y proteómica

Bases de datos – Uniprot (Universal Protein Resource) (www.uniprot.org)

Base de datos central para almacenar e interconectar información proteica de fuentes amplias y dispares. Se trata de un catálogo comprensible de secuencias proteicas y anotaciones funcionales

UniProtKB trpv1 Advanced | List Search

Popular organisms

- Mouse (15)
- Human (14)
- Rat (7)
- Bovine (2)

Taxonomy

Filter by taxonomy

Group by

- Taxonomy
- Keywords
- Enzyme Class

Proteins with

- 3D structure (34)
- Active site (9)
- Activity regulation (16)
- Alternative products (isoforms) (14)
- Alternative splicing (14)

More items

Protein existence

- Protein level (75)

UniProtKB 93 results

BLAST Align Map IDs Download Add View: Cards Table Customize columns Share

Entry	Entry Name	Protein Names	Gene Names	Organism	Length
<input type="checkbox"/> Q8NER1	TRPV1_HUMAN	Transient receptor potential cation channel subfamily V member 1 [...]	TRPV1, VR1	Homo sapiens (Human)	839 AA
<input type="checkbox"/> Q697L1	TRPV1_CANLF	Transient receptor potential cation channel subfamily V member 1 [...]	TRPV1	Canis lupus familiaris (Dog) (Canis familiaris)	840 AA
<input type="checkbox"/> Q704Y3	TRPV1_MOUSE	Transient receptor potential cation channel subfamily V member 1 [...]	Trpv1	Mus musculus (Mouse)	839 AA
<input type="checkbox"/> Q6RX08	TRPV1_RABIT	Transient receptor potential cation channel subfamily V member 1 [...]	Trpv1	Oryctolagus cuniculus (Rabbit)	842 AA
<input type="checkbox"/> Q6R5A3	TRPV1_CAVPO	Transient receptor potential cation channel subfamily V member 1 [...]	Trpv1	Cavia porcellus (Guinea pig)	839 AA
<input type="checkbox"/> O35433	TRPV1_RAT	Transient receptor potential cation channel subfamily V member 1 [...]	Trpv1, Vr1, Vr1l	Rattus norvegicus (Rat)	838 AA
<input type="checkbox"/> Q15139	KPCD1_HUMAN	Serine/threonine-protein kinase D1 [...]	PRKD1, PKD, PKD1, PRKCM	Homo sapiens (Human)	912 AA
<input type="checkbox"/> Q02156	KPCE_HUMAN	Protein kinase C epsilon type [...]	PRKCE, PKCE	Homo sapiens (Human)	737 AA
<input type="checkbox"/> Q86VP3	PACS2_HUMAN	Phosphofurin acidic cluster sorting protein 2 [...]	PACS2, KIAA0602, PACS1L	Homo sapiens (Human)	889 AA
<input type="checkbox"/> Q8NET8	TRPV3_HUMAN	Transient receptor potential cation channel subfamily V member 3 [...]	TRPV3	Homo sapiens (Human)	790 AA

1.5. Bioinformática y proteómica

Bases de datos – Expasy (Expert Protein Analysis System) (www.expasy.org)

Servidor de proteómica del Instituto Suizo de Bioinformática que proporciona acceso a multitud de herramientas y bases de datos relacionadas con proteínas.

The screenshot shows the Expasy Swiss Bioinformatics Resource Portal. At the top, the logo "Expasy" is displayed with the tagline "Swiss Bioinformatics Resource Portal". Below the logo is a search bar with a red magnifying glass icon and a list of example search terms: "e.g. BLAST, UniProt, MSH6, Albumin...". On the left side, there is a sidebar with a list of categories and sub-categories, each with a checkbox and a small icon. The categories are: Genes & Genomes (Genomics, Metagenomics, Transcriptomics), Proteins & Proteomes, Evolution & Phylogeny (Evolution biology, Population genetics), Structural Biology (Drug design, Medicinal chemistry, Structural analysis), Systems Biology (Glycomics, Lipidomics, Metabolomics), and Text mining & Machine learning. The main content area is titled "SIB Resources" and contains a grid of 12 resource cards. Each card has an icon, a title, and a brief description. The resources are: STRING (Protein-protein interaction networks and enrichment analysis), V-pipe (Viral genomics pipeline), SWISS-MODEL (Protein structure homology-modelling), Bgee (Gene expression expertise), Cellosaurus (Knowledge resource on cell lines), Nextstrain (Impact of pathogen genome data on science and public health), Glyco@Expasy (Zooming in on web-based glycoinformatics resources), SwissDrugDesign (Widening access to computer-aided drug design), UniProtKB/Swiss-Prot (Protein knowledgebase), ASAP (Web-based, cooperative portal for single-cell data analyses), Rhea (Expert-curated database of biochemical reactions), and SwissRegulon Portal (Tools and data for regulatory genomics).

Expasy
Swiss Bioinformatics Resource Portal

Search bar: e.g. [BLAST](#), [UniProt](#), [MSH6](#), [Albumin](#)...

SIB Resources

- Genes & Genomes**
 - Genomics
 - Metagenomics
 - Transcriptomics
- Proteins & Proteomes**
- Evolution & Phylogeny**
 - Evolution biology
 - Population genetics
- Structural Biology**
 - Drug design
 - Medicinal chemistry
 - Structural analysis
- Systems Biology**
 - Glycomics
 - Lipidomics
 - Metabolomics
- Text mining & Machine learning**

SIB Resources

- STRING**
Protein-protein interaction networks and enrichment analysis
- V-pipe**
Viral genomics pipeline
- SWISS-MODEL**
Protein structure homology-modelling
- Bgee**
Gene expression expertise
- Cellosaurus**
Knowledge resource on cell lines
- Nextstrain**
Impact of pathogen genome data on science and public health
- Glyco@Expasy**
Zooming in on web-based glycoinformatics resources
- SwissDrugDesign**
Widening access to computer-aided drug design
- UniProtKB/Swiss-Prot**
Protein knowledgebase
- ASAP**
Web-based, cooperative portal for single-cell data analyses
- Rhea**
Expert-curated database of biochemical reactions
- SwissRegulon Portal**
Tools and data for regulatory genomics

1.5. Bioinformática y proteómica

Bases de datos – Expasy (Expert Protein Analysis System) (www.expasy.org)

PeptideMass – identificación de péptidos (caracterización expresión proteica)
(www.expasy.org/peptide_mass/)

Expasy

PeptideMass

Home | Contact

PeptideMass

PeptideMass [\[references\]](#) cleaves a protein sequence from the UniProt Knowledgebase (Swiss-Prot and TrEMBL) or a user-entered protein sequence with a chosen enzyme, and computes the masses of the generated peptides. The tool also returns theoretical isoelectric point and mass values for the protein of interest. If desired, PeptideMass can return the mass of peptides known to carry post-translational modifications, and can highlight peptides whose masses may be affected by database conflicts, polymorphisms or splice variants.

[Instructions](#) are available.

Enter a UniProtKB protein identifier, ID (e.g. ALBU_HUMAN), or accession number, AC (e.g. P04406), or an amino acid sequence (e.g. 'SELVEGVIV'; you may specify post-translational modifications, but [PLEASE read this document first!](#)):

Reset the fields. Perform the cleavage of the protein.

The peptide masses are with cysteines treated with:

nothing (in reduced form)

☐ with acrylamide adducts

☐ with methionines oxidized

☒ [M+H]⁺ or ☐ [M] or ☐ [M-H]⁻ or ☐ [M+2H]²⁺ or ☐ [M+3H]³⁺

☐ average or ☒ monoisotopic.

Select an enzyme:

Trypsin

Data Analysis

Protein inference

4

Identificación peptídica y cuantificación

Intensity

m/z

viu
Universitat
Internacional
de Valencia

1.5. Bioinformática y proteómica

Bases de datos – NCBI (National Center for Biotechnology Information) (www.ncbi.nlm.nih.gov)

Base de datos que prové acceso a información biomédica y genómica.

The screenshot shows the NCBI National Library of Medicine homepage. The header includes the NIH logo, the text "National Library of Medicine National Center for Biotechnology Information", and a "Log in" button. Below the header is a search bar with a dropdown menu set to "All Databases" and a "Search" button. The main content area is divided into several sections. On the left is a vertical navigation menu with links to "NCBI Home", "Resource List (A-Z)", "All Resources", "Chemicals & Bioassays", "Data & Software", "DNA & RNA", "Domains & Structures", "Genes & Expression", "Genetics & Medicine", "Genomes & Maps", "Homology", "Literature", "Proteins", "Sequence Analysis", "Taxonomy", "Training & Tutorials", and "Variation". The central section is titled "Welcome to NCBI" and contains a paragraph about the center's mission. Below this are six icons representing different services: "Submit" (Deposit data or manuscripts into NCBI databases), "Download" (Transfer NCBI data to your computer), "Learn" (Find help documents, attend a class or watch a tutorial), "Develop" (Use NCBI APIs and code libraries to build applications), "Analyze" (Identify an NCBI tool for your data analysis task), and "Research" (Explore NCBI research and collaborative projects). On the right side, there is a "Popular Resources" list including PubMed, Bookshelf, PubMed Central, BLAST, Nucleotide, Genome, SNP, Gene, Protein, and PubChem. Below this is a "NCBI News & Blog" section with several news items, including "Using Average Nucleotide Identity (ANI) to Expose Potentially Problematic Taxonomic Merges" dated 02 Aug 2023, "New Annotations in RefSeq!" dated 24 Jul 2023, and "In April, May, and June, the NCBI Eukaryotic Genome Annotation Pipeline released eight new new" dated 20 Jul 2023. At the bottom, there is a "COVID-19 Information" section with links to "Public health information (CDC)", "Research information (NIH)", "SARS-CoV-2 data (NCBI)", "Prevention and treatment information (HHS)", and "Español".

The screenshot shows the NCBI BLAST Basic Local Alignment Search Tool page. The header includes the NIH logo, the text "National Library of Medicine National Center for Biotechnology Information", and a "Log in" button. Below the header is a navigation bar with links to "Home", "Recent Results", "Saved Strategies", and "Help". The main content area is titled "BLAST®" and features a prominent banner that says "Take the BLAST survey today" with a "Start survey" button. Below this is a section titled "Basic Local Alignment Search Tool" with a description of BLAST and a "Learn more" link. To the right of this section is a "NEWS" box titled "BLAST Quick Start guides!" with the text "Need some help getting started with BLAST?" and the date "Thu, 22 Jun 2023", along with a "More BLAST news..." link. Below the "Basic Local Alignment Search Tool" section is a "Web BLAST" section with three main options: "Nucleotide BLAST" (nucleotide > nucleotide), "blastx" (translated nucleotide > protein), and "tblastn" (protein > translated nucleotide). To the right of these options is a "Protein BLAST" section (protein > protein) with a molecular structure diagram. The bottom of the page features a "Required for NSF grant application submissions beginning October 2023" notice and a "More..." link.

1.5. Bioinformática y proteómica

Bases de datos estructurales:

Protein Data Bank (www.rcsb.org) /Europa (www.ebi.ac.uk/pdbe/) /Japón (www.pdbj.org)

The screenshot displays the RCSB PDB website. The top navigation bar includes links for Deposit, Search, Visualize, Analyze, Download, Learn, About, Documentation, Careers, and COVID-19, along with MyPDB and Contact us buttons. The main header shows the PDB logo, statistics (208,066 Structures, 1,068,577 CSMs), a search bar, and a 3D Structures dropdown. A banner below the header promotes 'New: More Computed Structure Models (CSM) available'. The left sidebar contains a 'Welcome' section and navigation links for Deposit, Search, Visualize, Analyze, Download, and Learn. The main content area features a 'Welcome' message, a list of data types (Experimentally-determined 3D structures and Computed Structure Models), and a section for 'Explore NEW Features' and 'PDB-101 Training Resources'. On the right, the 'August Molecule of the Month' section displays a 3D model of ATM and ATR Kinases.

RCSB PDB Deposit Search Visualize Analyze Download Learn About Documentation Careers COVID-19 MyPDB Contact us

RCSB PDB PROTEIN DATA BANK

208,066 Structures from the PDB

1,068,577 Computed Structure Models (CSM)

3D Structures Enter search term(s), Entry ID(s), or sequence Include CSM

Advanced Search | Browse Annotations Help

PDB-101 PDB EMDDataResource NAKB wwPDB Foundation PDB-Dev

New: More Computed Structure Models (CSM) available Learn more

Welcome

Deposit

Search

Visualize

Analyze

Download

Learn

RCSB Protein Data Bank (RCSB PDB) enables breakthroughs in science and education by providing access and tools for exploration, visualization, and analysis of:

- Experimentally-determined 3D structures from the **Protein Data Bank (PDB)** archive
- Computed Structure Models (CSM)** from AlphaFold DB and ModelArchive

These data can be explored in context of external annotations providing a structural view of biology.

Explore NEW Features

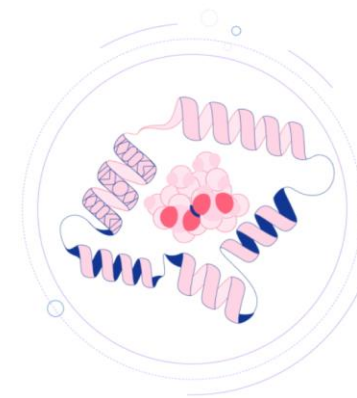
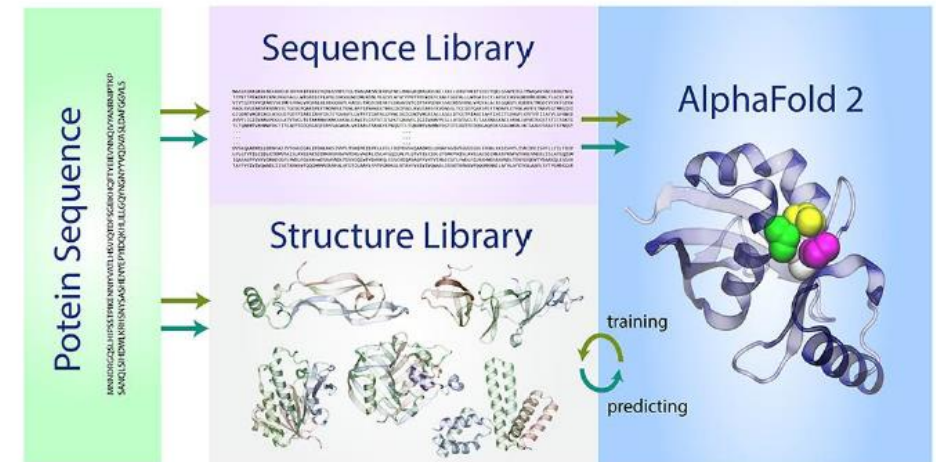
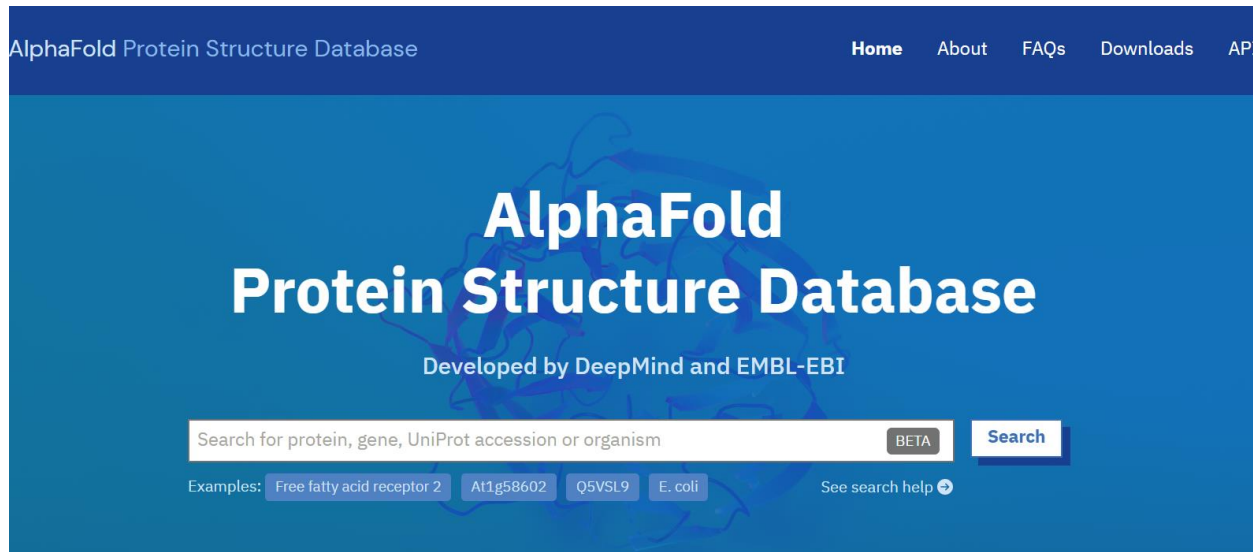
PDB-101 Training Resources

August Molecule of the Month

ATM and ATR Kinases

1.5. Bioinformática y proteómica

Bases de datos estructurales - AlphaFold (www.alphafold.ebi.ac.uk)

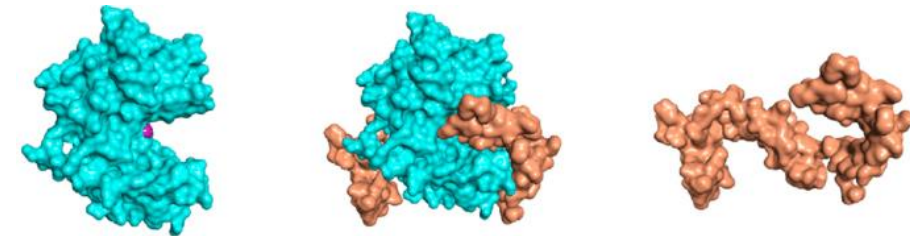
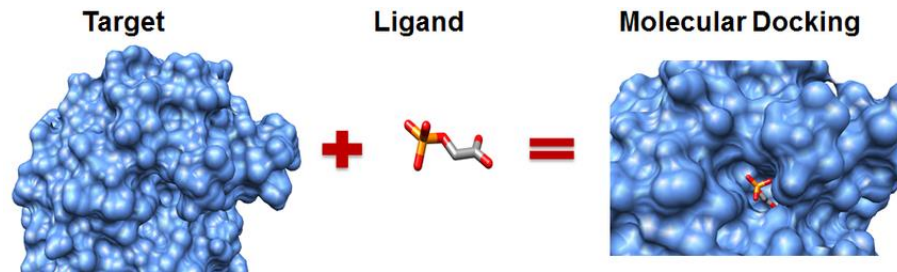
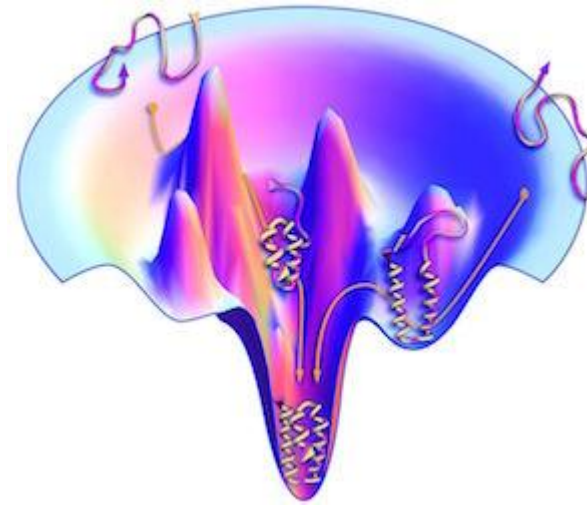


Currently, there are around **230 million proteins** in UniProt, with millions more catalogued every year. Each one has a unique 3D shape that determines how it works and what it does. AlphaFold DB now offers a prediction of what each of the over 200 millions known proteins in UniProt might look like.

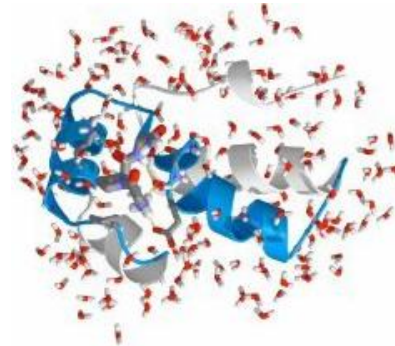
1.5. Bioinformática y proteómica

Bioinformática estructural

- Plegamiento de proteínas (*folding*)
 - *Ab initio*
 - *Homology modelling*
- Acoplamiento molecular (*docking*)
 - Proteína-proteína
 - Proteína-péptido
 - Proteína-ligando químico
 - Proteína-ácido nucleico



- Dinámica molecular





viu

Universidad
Internacional
de Valencia

universidadviu.com

De:
 Planeta Formación y Universidades