

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

Resumen

Acoplamiento proteico



1- Búsqueda de orientaciones

Cuerpo rígido



1. Muestreo exhaustivo o búsqueda sistemática (se exploran todas las posibles orientaciones)

- a) FFT (*Fast Fourier Transform*)
 - i. Discretización: retícula (ej: FTDOCK)
- b) Fragmentación geométrica
 - i. Simplificación superficie proteica (ej: PatchDock)

2. Muestreo estocástico (se exploran pocas orientaciones, pero se evalúan energéticamente - Monte-Carlo, redes elásticas)

Simplificaciones:

- a) Potenciales energéticos pre-calculados (ej: ICM-DISCO)
- b) Centroides (ej: RosettaDock)
- c) Conocimiento residuos interaccionantes (ej: HADDOCK)

Resumen

Acoplamiento proteico



1- Búsqueda de orientaciones

Semiflexible



1. Cadenas laterales. Ajuste inducido
 - a) Minimización de cadenas laterales
 - i. Biblioteca de rotámeros
 - ii. Minimización de energía (gradiente conjugado – *steepest descent*)
 - iii. Refinado independiente (residuos con choques)
 - b) Modelo integrativo + dinámica molecular (ej: HADDOCK)

Flexible



1. Grandes cambios conformacionales. Ajuste inducido considerando flexibilidad conformacional
 - a) Proteínas multidominio: dominios rígidos + zonas lábiles (ej: FLEXDOCK)
 - b) Ensamblados conformacionales pre-calculados (ej: ATTRACT)

Resumen

Acoplamiento proteico



2- Funciones de puntuación

Pre – durante generación de orientaciones

Post – puntuación de modelos finales, filtrado, refinado



1. Complementariedad de forma
2. Complementariedad geométrica
3. Potenciales pre-calculados
 - a) Van der Waals
 - b) Electrostática
 - c) Puentes de hidrógeno
 - d) Hidrofobicidad
4. Potenciales pre-calculados + solvatación
5. Restricciones de distancia de residuos