

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

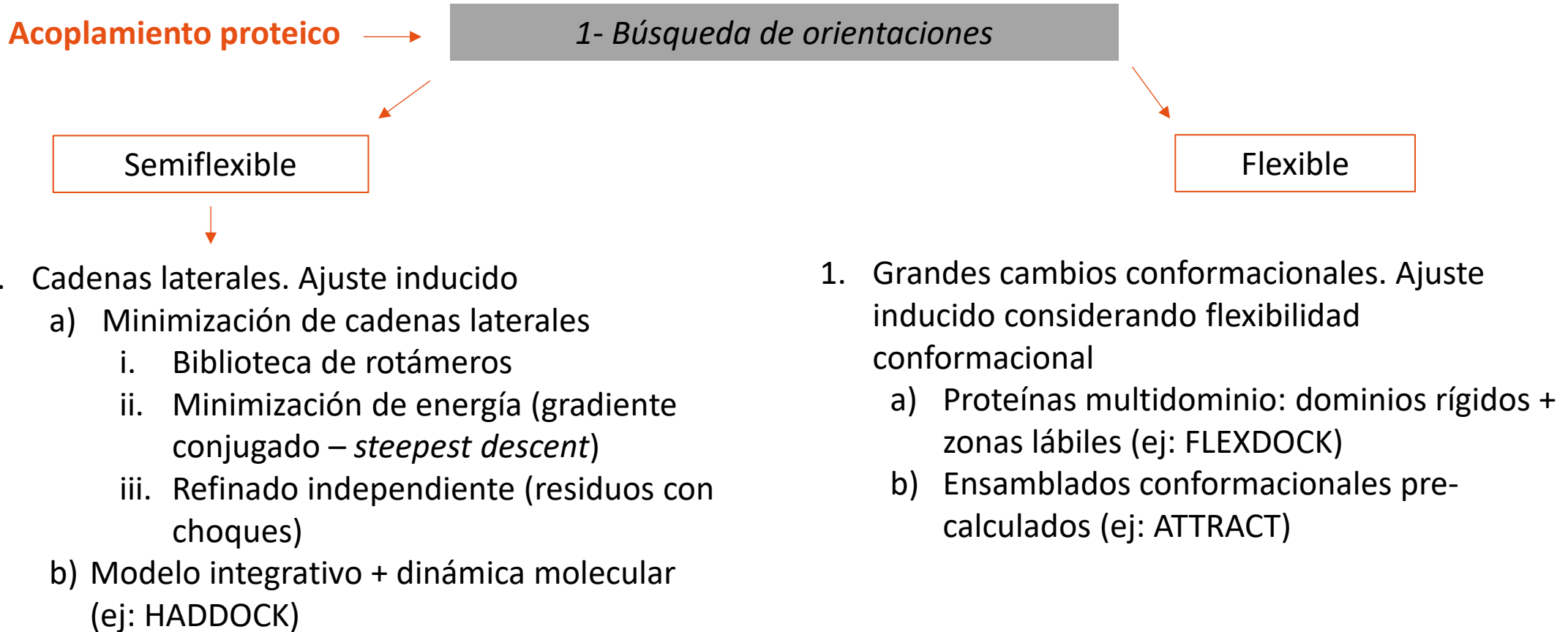
Acoplamiento proteico →

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



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