

Capítulo 1

Análisis Preliminar de Trayectorias

En este capítulo vamos a analizar dos trayectorias con características muy diferentes tanto en el método como fueron simuladas como en las características físicas de las proteínas. El objetivo de este análisis es obtener una visión previa de la forma de plegamiento de cada proteína de acuerdo a los valores de sus principales propiedades físicas y estructurales. Al mismo tiempo, con este análisis queremos que tan diferentes pueden ser los resultados de esta tesis frente a los resultados del trabajo de Garreta.

1.1. Características de las trayectorias

Las características de las dos trayectorias se pueden ver en la Table XXX, pero en general la primera trayectoria corresponde al de la proteína XXnombre de la proteínaXX (código PDB: 1FCA) que contiene 108 aminoácidos, simulada con el método PRM, y que contiene alrededor de 237 conformaciones. Mientras que la segunda trayectoria corresponde a YYYnombre de la proteínaYYY (código PDB: 2JOF), de 20 aminoácidos, simulada con el método de Dinámica Molecular en el supercomputador.

Antom, y que contiene un poco más de 1 millón de conformaciones.

Cuadro 1.1: Comparación de dos trayectorias con características diferentes.

	Trayectoria 1FCA	Trayectoria 2JOF
Tamaño Proteína	Mediano (108 AA)	Pequeño (20 AA)
Tamaño Trayectoria	Pequeña (237 conformaciones)	Grande (1 millon conformaciones)
Método Simulación	PRM	Dinámica Molecular

1.2. Evaluación de las propiedades

Presentamos en la Figura 1.1 los valores calculados a las conformaciones de las trayectorias de dos proteínas de acuerdo a las características de las trayectorias mostradas anteriormente. En la primera trayectoria (proteína 1FCA) observamos una tendencia donde los valores crecen o disminuyen progresivamente de acuerdo a la propiedad, lo que sirvió a Luis Garreta para caracterizar estados de plegamiento iniciales, intermedios, y finales. Sin embargo, en las trayectorias que estamos analizando en esta tesis (proteína 2JOF) solo se alcanza a observar el estado inicial (círculo rojo) el estado final (círculo azul), ya que los cambios de los valores de las propiedades en el transcurso del plegamiento son súbitos.

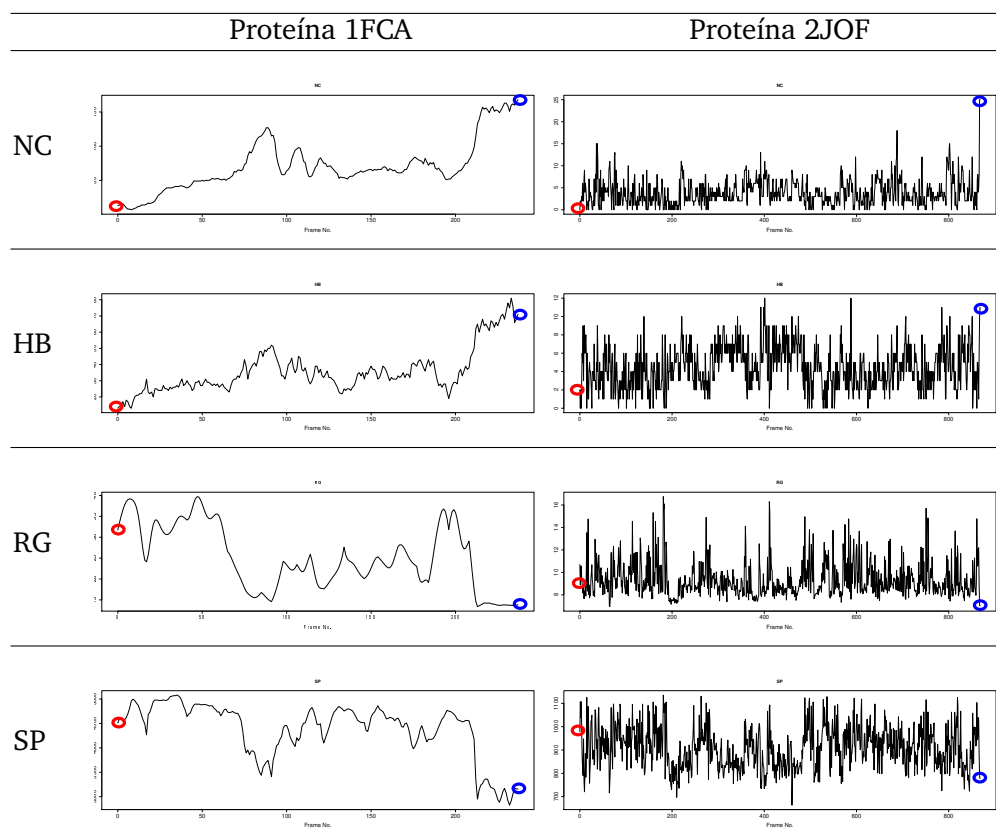


Figura 1.1: Comparación de los valores de propiedades de dos trayectorias.