



Julio Coll <juliocollm@gmail.com>

ejemplo de trabajo de docking

1 mensaje

Julio Coll <juliocollm@gmail.com>

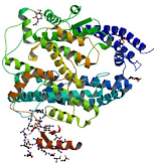
31 de marzo de 2020, 21:30

Para: Javier Fernández-Portal Díaz del Río <javier.f.portal@gmail.com>, JulioColl <juliocollm@gmail.com>

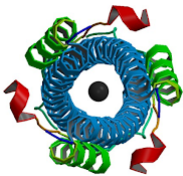
He rememorizado brevemente algunas cosillas que tengo recientes.

Te mando uno de los trabajos de docking entre la proteína c reactiva y los hydroxicholesteroles para que te hagas una idea de cosas que se pueden hacer por docking y predecir comportamientos de proteínas.

En el caso que nos ocupa. Un rapido vistazo me sugiere que uno de los receptores es la angiotensin-converting enzyme 2 (ACE2). Se conoce su estructura 3D. Puedes acceder a todos sus detalles en: <http://www.rcsb.org/structure/1R42>



La glicoproteína del coronavirus SARS tambien esta cristalizada y la estrucutra 3D la puedes encontrar en <http://www.rcsb.org/structure/1WYY> . La de la spike del KOVI-19 la acaban de publicar (te adjunto el paper)



Despues habria que modelizar la proteina homologa del COVI con su secuencia publicada (todavia no les ha dado tiempo de cristalizarla) pero será muy parecida al del SARS. Una vez tienes las estructuras target se trataría de probar compuestos de bajo peso molecular para ver si hay alguno que predijera un fuerte ligamiento (docking) utilizando programas de ordenador. Tambien se puede estudiar por donde interacciona la proteina viral y su receptor, los efectos de las mutaciones en las interacciones, etc, etc.

Esto es solo un "aperitivo". ¿Sigues ahí? 😊

salu2, julio


--


Dr. Julio M. Coll
Dr.Biología. Universidad Complutense, Madrid, SPAIN
pHD in Biology.Massachusetts Institute of Technology, Boston, USA
Profesor de Investigación

Dpt.Biotecnología, SGIT, INIA
telf: 680154451 juliocollm@gmail.com

La reproduccion de los genomas: <http://www.jcoll.org>
Publicaciones científicas: <http://www.jcoll.org/coll-pdfs/>

2 archivos adjuntos

 **Bello-Perez 2019 CRP 25HOCh.pdf**
3362K

 **Coutar 2020 COVI219 spike glycoprotein.pdf**
1181K