

JST: investigando la secuencia de macromoléculas en su estructura tridimensional

Angel Herráez

Dep. de Bioquímica y Biología Molecular



Universidad de Alcalá

angel.herraez@uah.es

(Alcalá de Henares)

JST (Jmol Sequence Tool) es una aplicación informática que permite estudiar de forma interactiva la interrelación entre la estructura terciaria de una proteína o ácido nucleico y su secuencia.

Datos de entrada: archivo de coordenadas atómicas de cualquier molécula cuya estructura tridimensional haya sido resuelta, calculada o simulada. Formatos pdb (v2 y v3), mmcif, cml...

podemos ofrecer una lista preparada de moléculas

o leer una estructura directamente desde Protein Data Bank²

JST: herramienta de secuencia de Jmol

Modelo interactivo de la estructura tridimensional (utiliza Jmol¹)

La secuencia se extrae automáticamente del archivo de estructura

De 3D a secuencia:

1. Sobre la estructura, marcamos con el ratón un átomo.
2. Vemos la identidad del residuo al que pertenece.
3. Vemos su posición en la secuencia.

De secuencia a 3D:

1. Seleccionamos un residuo.
2. Vemos su identidad.
3. Vemos su ubicación en la estructura.

Aplicabilidad

JST se ejecuta como página web. Por ello, puede utilizarse tanto localmente como por la red, e integrarse en diferentes entornos preexistentes, tales como páginas web de investigación o docentes, páginas del proyecto Proteopedia³ o la aplicación en línea FirstGlance⁴. Resulta así prometedor para el desarrollo de actividades de investigación de estructuras conocidas, actividades de autoaprendizaje, estudio de la relación entre estructuras primaria y terciaria, apoyo docente, etc.

Detalle de especificaciones

El archivo de coordenadas atómicas puede ser local u obtenerse directamente de Protein Data Bank² y corresponder a proteínas, ácidos nucleicos o complejos de ambos.

La secuencia ofrecida combina la información de los campos ATOM y SEQRES del archivo pdb. De ese modo, se reconocen y señalan residuos insertados, brechas en la numeración, residuos ausentes por desorden cristalográfico, microheterogeneidad de secuencia y residuos con conformaciones alternativas.

Se reconocen los residuos no canónicos, los cofactores y el disolvente. Se identifican, separan y procesan todas las cadenas.

Disponible en <http://biomodel.uah.es/Jmol/jst/>

Licencia de uso: Creative Commons Reconocimiento - NoComercial - CompartirIgual

Referencias:

1. Jmol: un visor Java de código abierto para estructuras químicas en tres dimensiones.

2. Protein Data Bank: an information portal to biological macromolecular structures.

3. Proteopedia (Life in 3D): the free, collaborative 3D encyclopedia of proteins and other molecules.

4. FirstGlance in Jmol: a simple tool for macromolecular visualization.

<http://www.jmol.org/>

<http://www.pdb.org/>

<http://www.proteopedia.org/>

<http://firstglance.jmol.org/>