

Hoja de trabajo de estructuras de proteínas de impresión 3D

¡La seguridad es lo primero! Obtenga el permiso de un adulto antes de descargar cualquier programa (software) o archivo en su computadora. Precaución: tenga cuidado con la impresión, aunque es algo resistente, principalmente está diseñada para ser vista y podría romperse si se aplasta o se cae.

Introducción: Si bien es posible que no pueda realizar la actividad asociada con la proteína impresa en 3D desde su hogar, esperamos que esta hoja de trabajo lo ayude a estar preparado para imprimir su propia proteína en el Espacio de creación de la biblioteca pública de Corona pronto. Mientras tanto, puede divertirse aprendiendo sobre diferentes proteínas y observando estructuras del *Protein Data Bank*.

Enlace de video de YouTube del laboratorio Martin en UC Irvine: <https://youtu.be/m4EUzpv7IPw>

Procedimiento (*modificado de la Referencia # 3*)

Configuración:

1. Descarga UCSF Chimera <https://www.cgl.ucsf.edu/chimera/olddownload.html>

Encontrar una proteína:

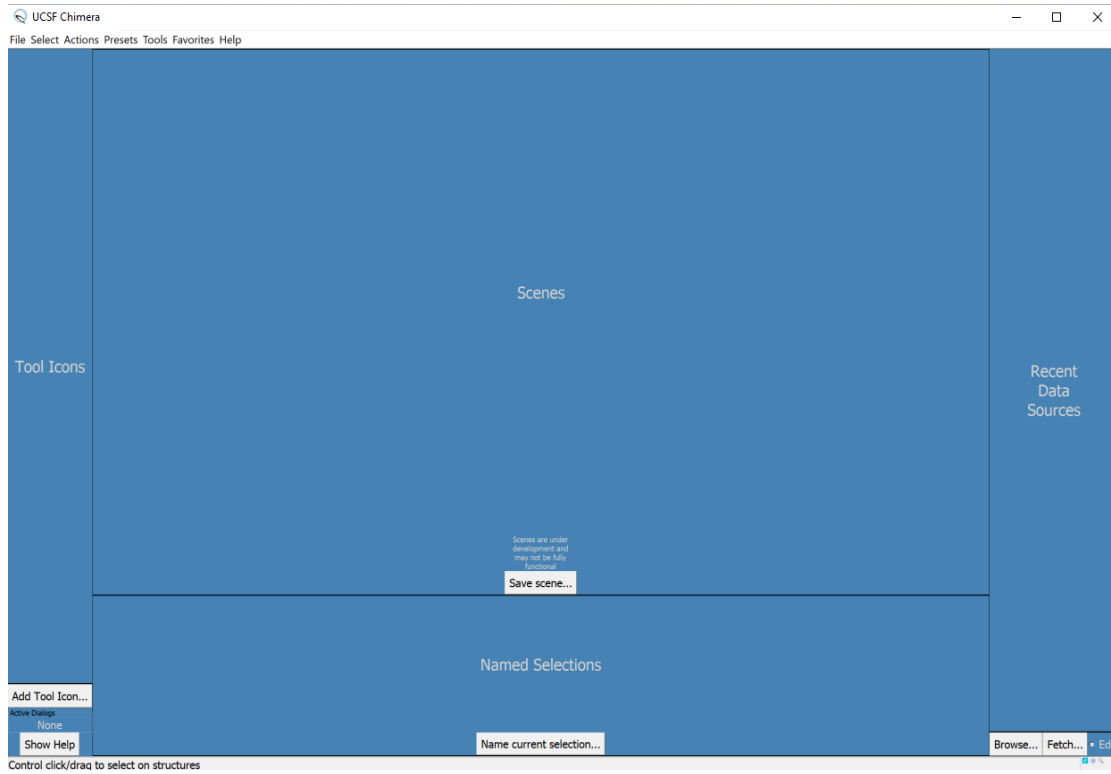
2. Visite <https://www.rcsb.org/>
 - a. Utilice la opción de búsqueda para encontrar una proteína que le interese.
 - b. Si no está seguro, intente buscar "2M3T", que le llevará a la estructura de RMN en estado de solución de la gamma (S) -cristalina humana resuelta por el laboratorio de Martin en UC Irvine. ¡Esta es una proteína en el lente de su ojo que le ayuda a ver al refractar la luz en su retina!
3. Anote el ID (combinación de cuatro dígitos de letras y números) o vaya al menú desplegable Descargar archivos en la esquina superior derecha y haga clic en Formato PDB.
 - a. Tenga en cuenta que para las proteínas resueltas por RMN, puede ver más de una estructura resuelta. A esto se le llama conjunto sobre la Vista 3D en la parte izquierda de la página (esto se debe a que las proteínas pueden tener partes que se mueven mucho; el conjunto representa algunas de las conformaciones de menor energía). Si este es el caso, cuando abra el menú desplegable Descargar archivos, seleccione Ensamblaje biológico 1 para obtener solo una estructura.

Contacto: martinlabuci@gmail.com
www.probeMonkey.com

Encuentre más acerca de nuestra investigación en:

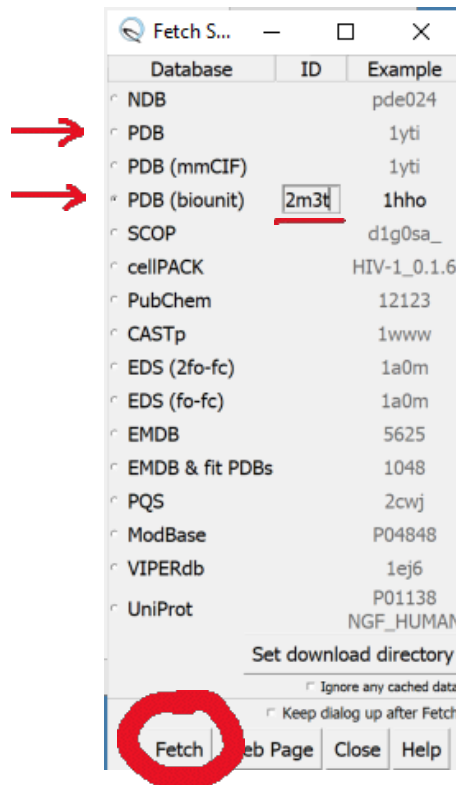
Apertura de una estructura de proteína en quimera:

4. Abra el programa UCSF Chimera en su computadora. El programa debería aparecer como se muestra a continuación:



Contacto: martinlabuci@gmail.com Encuentre más acerca de nuestra investigación en: www.probeMonkey.com

5. Para abrir su archivo de estructura de proteínas, realice una de las siguientes acciones:
 - a. Vaya a Archivo → Obtener por ID. Luego, ingrese la ID que anotó en el cuadro de texto en blanco junto a PDB (solo estructura) o PDB (bio-unidad) (conjunto de RMN) en la ventana emergente que aparece. Luego, haz clic en Obtener en la parte inferior izquierda.

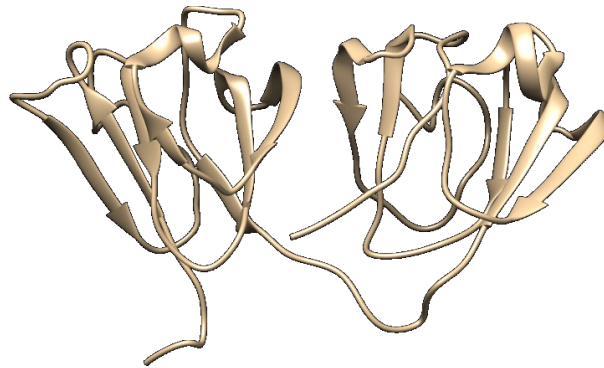


o

- b. Vaya a Archivo → Abrir y seleccione el archivo .pdb (única estructura) o .pdb1.gz (conjunto de RMN) para su proteína. Esto puede requerir que se desplace hacia la izquierda para encontrar la carpeta donde se guarda su archivo, posiblemente en Descargas.

Ahora debería ver una estructura de proteína similar a la de la Vista 3D en la página RCSB. Esta representación se llama diagrama de cinta. ¡Esto hace que sea fácil ver los componentes estructurales de la proteína y creemos que se ven muy bien de esta manera también! Haz clic derecho y mantén presionado para rotar tu proteína y verla desde diferentes orientaciones. Haga clic con el botón izquierdo y manténgalo presionado para acercar o alejar.

El ejemplo que se muestra es 2M3T.

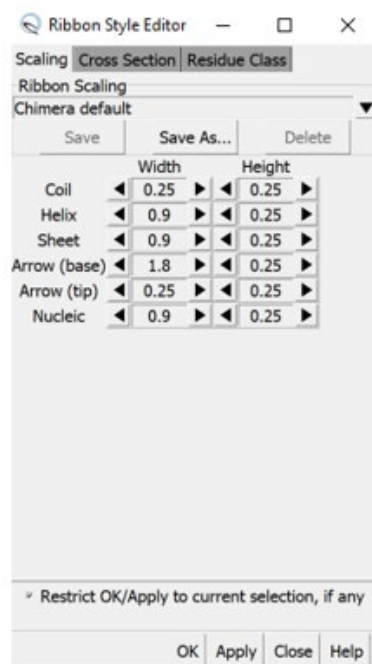


Preparación del archivo de proteínas para la impresión 3D:

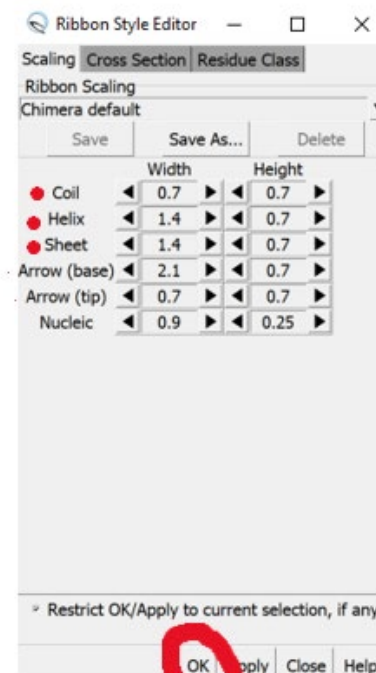
Nota: Los siguientes pasos harán que la estructura general sea más gruesa, haciéndola más rígida, lo que probablemente ayudará a producir una impresión exitosa.

6. Vaya a Herramientas → Representación → Editor de estilos de cinta. Debería aparecer una ventana emergente.
7. Ajuste los siguientes parámetros a partir de los valores iniciales:
 - a. Cambie la altura de cada elemento a al menos 0.7
 - b. Cambie el ancho de la bobina a 0.7; Hélice a 1.4; Hoja a 1.4; Flecha (base) a 2.1; Flecha (punta) a 0.7. Luego haga clic en Aplicar / Aceptar.
 - c. A continuación se muestra una representación de los parámetros de inicio y finalización en la ventana emergente.

COMIENZO O PRINCIPIO

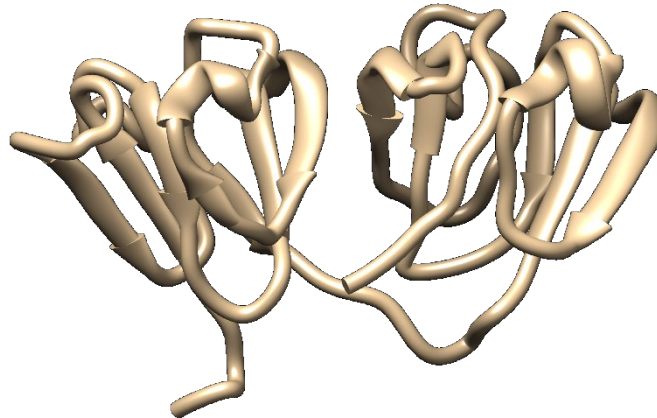


FIN



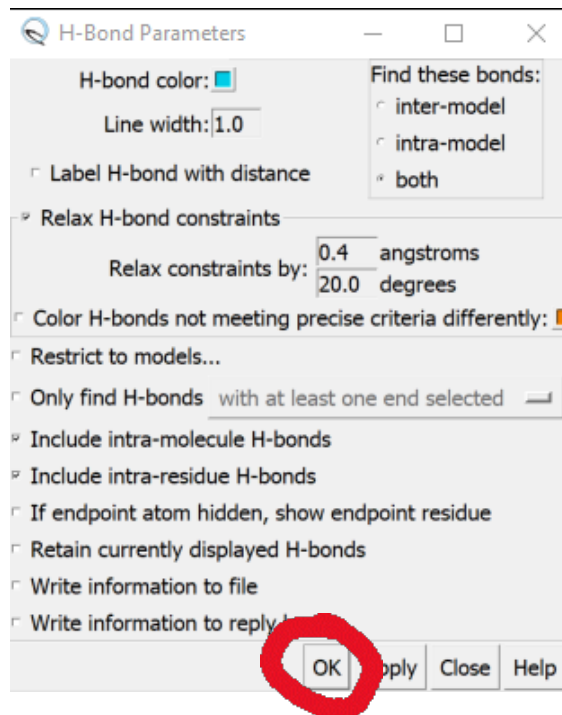
Contacto: martinlabuci@gmail.com Encuentre más acerca de nuestra investigación en: www.probeMonkey.com

Su proteína ahora debería verse más gruesa en general como se muestra a continuación.

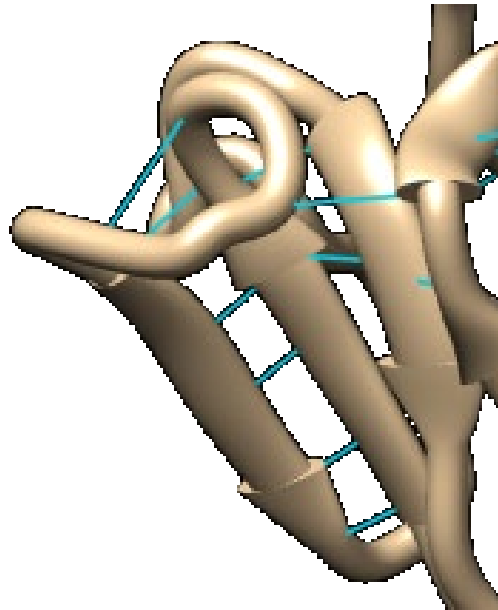


Próximamente, agregaremos una estructura adicional para ayudar a la impresión.

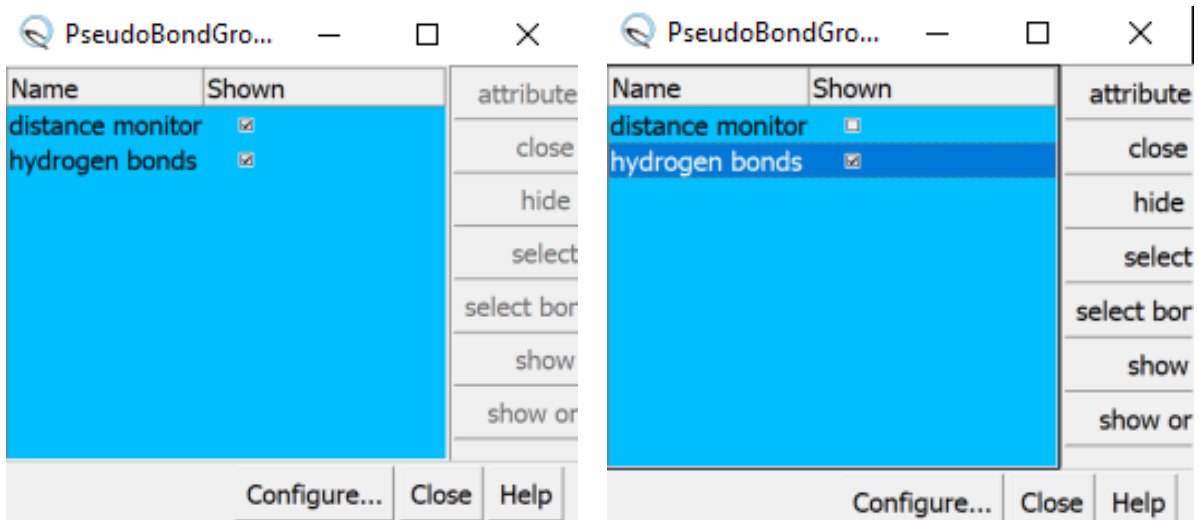
8. Vaya a Herramientas → Análisis de estructura → Encuentre los enlaces de hidrógeno (H). No es necesario que cambie nada en esta ventana emergente, simplemente haga clic en Aceptar.



Ahora debería ver los enlaces de hidrógeno como líneas azules en partes de la proteína como se muestra a continuación (ampliado).

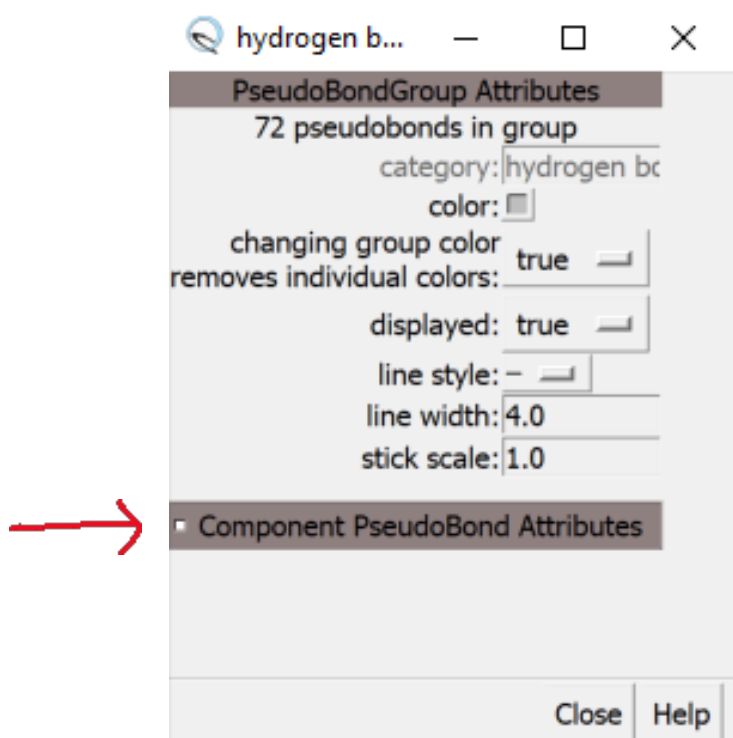


9. Vaya a Herramientas → Controles generales → Panel PseudoBond. Aparecerá otra ventana emergente como se muestra a continuación. Asegúrese de que solo los enlaces de hidrógeno estén marcados / seleccionados y luego haga clic en "atributos".



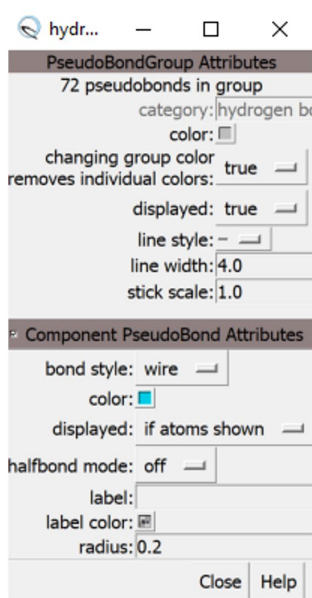
Contacto: martinlabuci@gmail.com Encuentre más acerca de nuestra investigación en: www.probemonkey.com

10. En la siguiente pantalla verá la opción componente del atributo al enlace falso (Component PseudoBond Attributes). Marque esto para abrirlo.

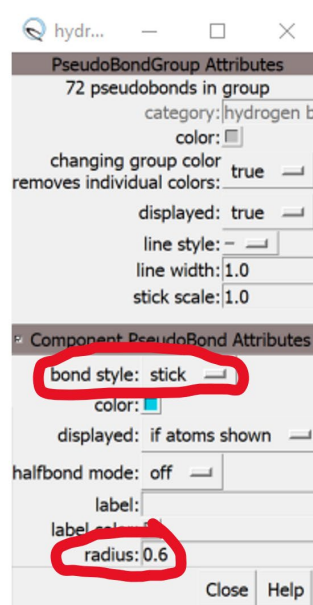


11. Una vez abierto, cambie el estilo de enlace de "alambre" a "pegar" usando el menú desplegable y cambie el radio de 0.2 a 0.6.

COMIENZO O PRINCIPIO



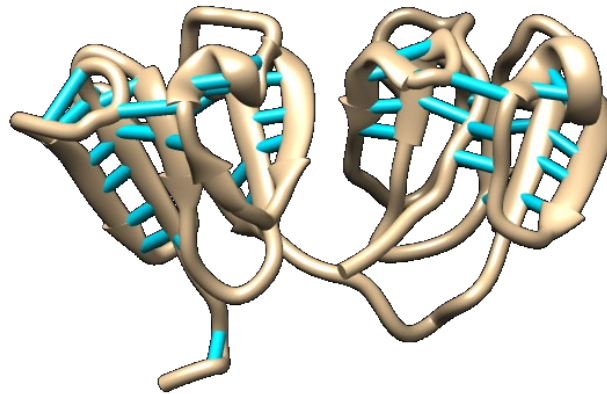
FIN



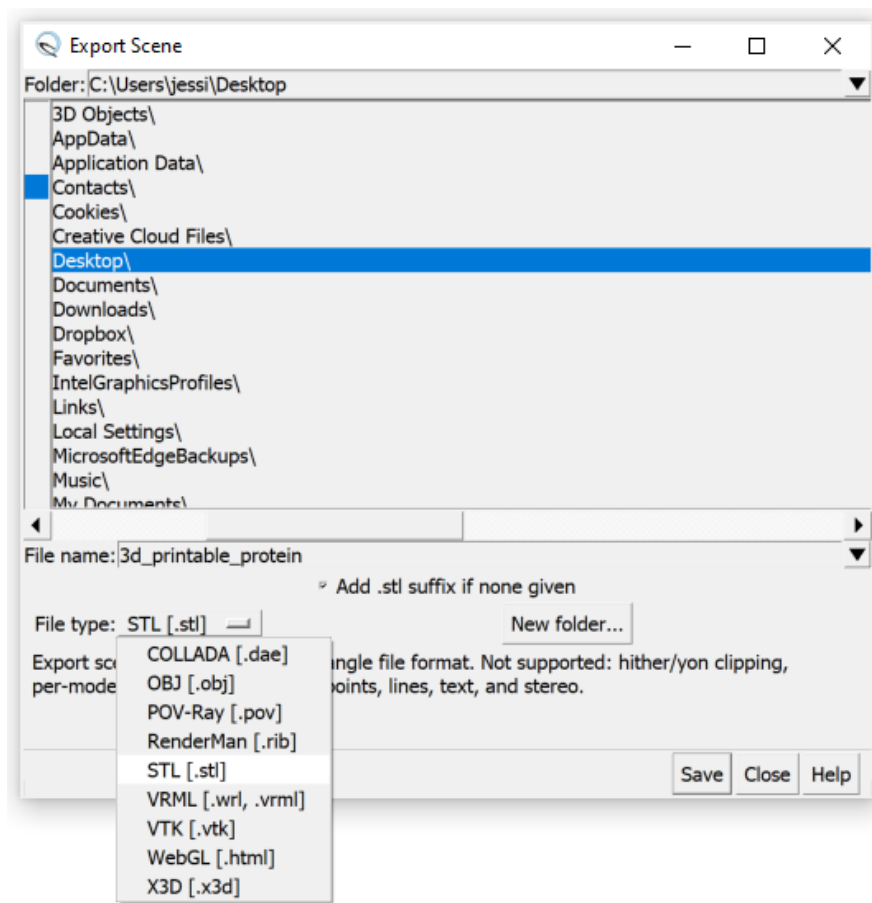
Contacto: martinlabuci@gmail.com
www.probeMonkey.com

Encuentre más acerca de nuestra investigación en:

¡Su proteína ahora debería tener un aspecto similar a lo que se muestra a continuación y está casi lista para imprimir en 3D!



12. Para guardar el archivo en un formato que sea reconocible por la mayoría de los programas (software) de impresora 3D, vaya a Archivo > Exportar escena. Elija dónde guardar su archivo, el nombre y en el menú desplegable Tipo de archivo elija STL.



Contacto: martinlabuci@gmail.com Encuentre más acerca de nuestra investigación en: www.probemonkey.com

¡Ahora puede llevar este archivo a la biblioteca para imprimir su proteína! Más allá de esto, los detalles de cómo configurar las impresiones variarán según su impresora y el material con el que esté imprimiendo, por lo que es mejor seguir las instrucciones desarrolladas en el sitio.

Si su impresión falla, comience a discutir esto con el personal experto en *Makerspace*, ya que podría necesitar ajustes en los soportes u otros aspectos de la configuración de la impresión. Si ese no es el caso, considere volver al paso 7 y ajuste los parámetros para que sean proporcionalmente más grandes, o busque la Referencia n.º3 para ver otras consideraciones y opciones más detalladas. También puede probar esto con otras proteínas de la PDB: busque insulina humana o revise la molécula del día.

Observaciones / Discusión:

1. ¿Qué elementos de la estructura secundaria ve en la impresión 3D del inserto específico de la planta (PSI) que venía en su material?
2. ¿Qué notas sobre la estructura secundaria de la proteína que has modelado en Chimera? (Sugerencia: es algo que seleccionó para mostrar como parte del proceso).
3. ¿Cómo se compara la estructura de la proteína que eligió del banco de datos con el PSI? ¿Que es lo mismo? ¿Que es diferente?

¡No dude en escribirnos y decirnos qué proteína eligió y por qué! ¡Esperamos poder hablar con usted más sobre las estructuras de proteínas y la impresión 3D!

Referencias adicionales:

1. ¿Qué tan pequeño es un átomo? <https://youtu.be/yQP4UJhNn0I>
2. Más sobre Drosera capensis: https://en.wikipedia.org/wiki/Drosera_capensis
3. Impresión 3D de modelos biomoleculares para investigación y pedagogía (escrito) <https://www.ncbi.nlm.nih.gov/pmc/articles/PMC5408980/>
4. Impresión 3D de modelos biomoleculares para investigación y pedagogía (video) https://www.ncbi.nlm.nih.gov/pmc/articles/PMC5408980/bin/jove-121-55427-pmcvs_normal.mp4
5. Intercambio de impresión 3D de los Institutos Nacionales de Salud (NIH) <https://3dprint.nih.gov/>