



REVISTA DE LA ACADEMIA
COLOMBIANA DE CIENCIAS
EXACTAS, FÍSICAS Y NATURALES

www.raccefy.com

Información suplementaria

Modelamiento molecular y análisis estructural de la variante I684S en la enzima TYK2 y su relación con la susceptibilidad a la enfermedad Psoriasis

Yesid Álvarez, Alejandro Soto-Ospina, Andrés Villegas Lanau, Pedronel Araque, Carlos Andrés Naranjo, Esteban Uribe, Sol Jiménez, Elsa Vásquez, Gabriel de Jesús Bedoya, Margarita Velásquez

Autor correspondencia, Alejandro Soto-Ospina¹**correo electrónico, yesid.alvarez@udea.edu.co**

Contenido

- Fig.Sup.1.
- Fig.Sup.2.
- Fig.Sup.3.
- Tabla Sup.1.
- Fig.Sup.4.
- Fig.Sup.5,

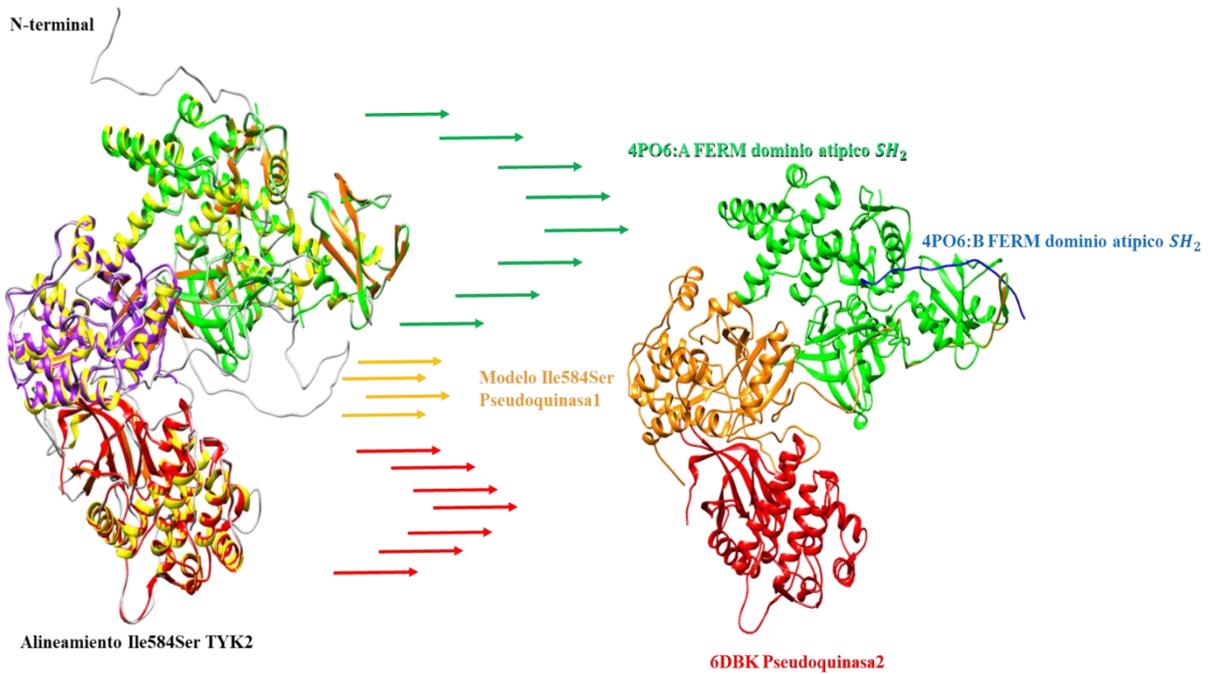


Fig.Sup.1. Representación estructural de los modelos obtenidos por predicción: A) Modelo hipotético de Ile684SerTYK2 con la enzima silvestre (Izquierda); Modelo hipotético de la variante Ile684Ser en la enzima TYK2 (Derecha).

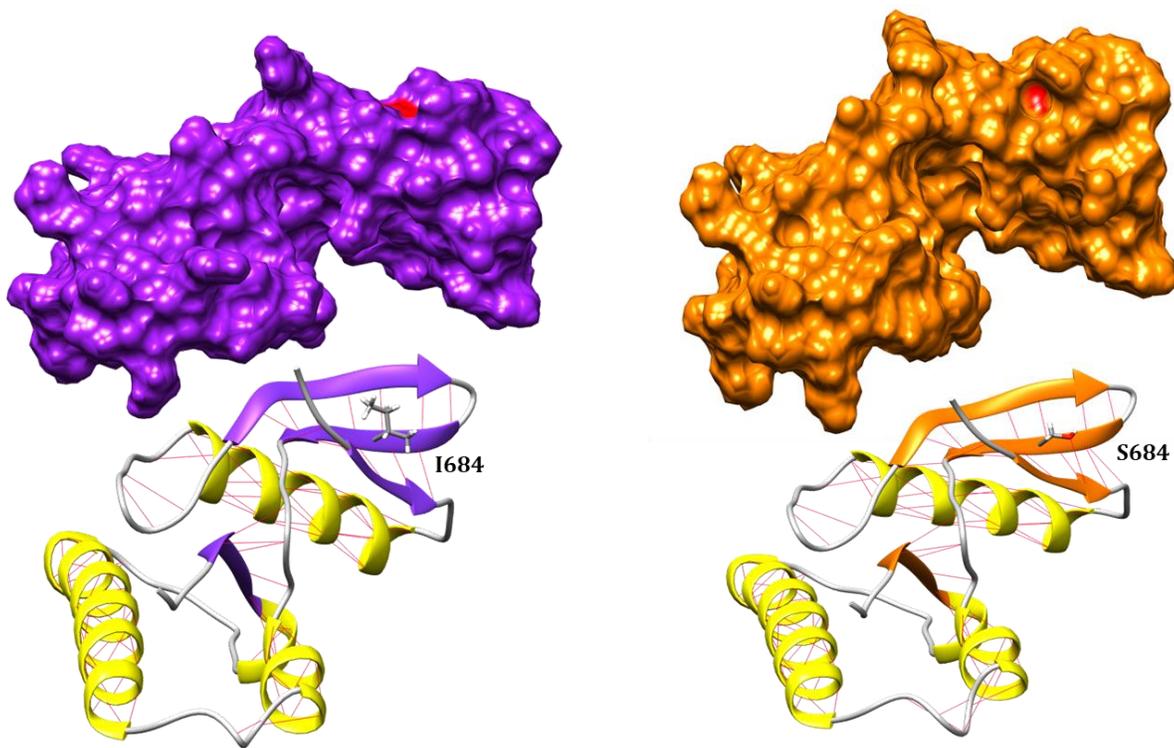
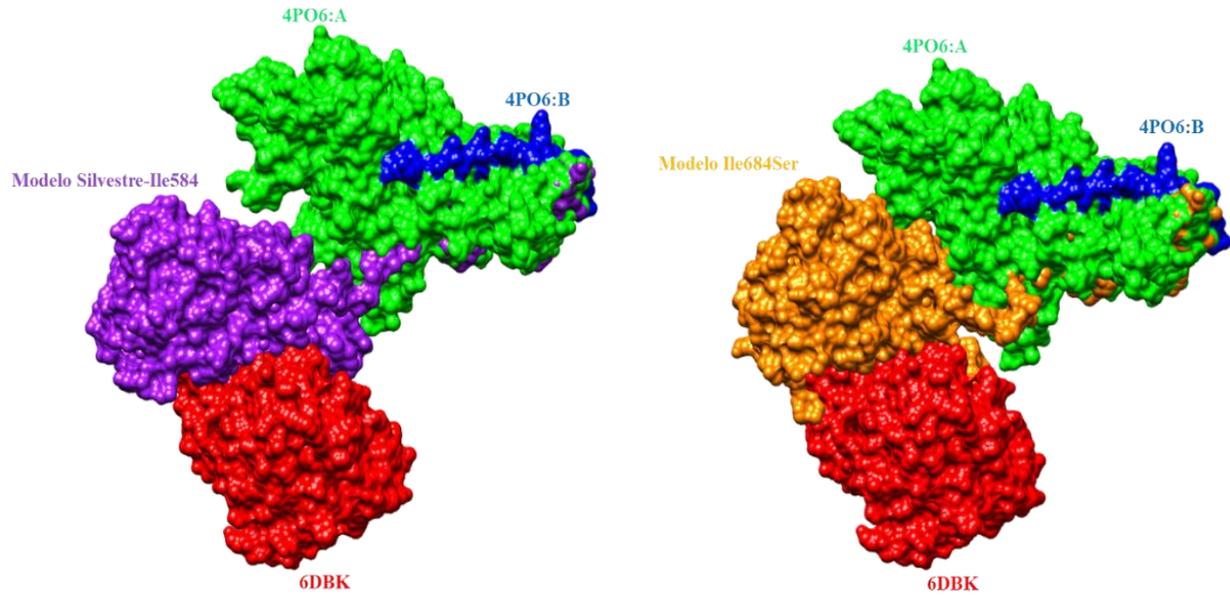


Fig.Sup.2. Representación estructural del dominio pseudoquinasa1 para la enzima TYK2: (Izquierda) Modelo de la enzima nativa con representación de estructura secundaria y la localización de la mutación en rojo en la superficie de densidad; (Derecha) Modelo de la enzima mutada TYK2 I684S con la mutación resaltada en rojo en superficie de densidad.

TYK2wt										
H-Donador (Nitrógeno)	Aminoácido	Átomo donador	H-Donador (Oxígeno)	Aminoácido	Átomo donador	H-Aceptor	Aminoácido	Átomo aceptor	Distancia D-Aceptor	Distancia D-H-Aceptor
VAL	640	N	MET	685	O	VAL	640	H3	5.861	5.210
VAL	640	N	THR	687	O	VAL	640	H3	2.555	1.802
LYS	642	N	MET	685	O	LYS	642	H	3.100	2.261
LEU	644	N	ASN	683	O	LEU	644	H	2.897	1.935
ASP	645	N	ASP	645	OD1	ASP	645	H	2.620	2.180
GLY	680	N	GLU	682	O	GLY	680	H3	4.744	3.990
GLU	682	N	GLY	680	O	GLU	682	H	3.231	2.867
ASN	683	N	LEU	644	O	ASN	683	H	3.778	2.874
ASN	683	ND2	LEU	644	O	ASN	683	HD22	5.486	4.904
MET	685	N	LYS	642	O	MET	685	H	3.069	2.105
THR	687	N	VAL	640	O	THR	687	H	3.822	2.949
GLU	688	N	THR	687	OG1	GLU	688	H	3.061	2.476
TYK2-I684S										
H-Donador (Nitrógeno)	Aminoácido	Átomo donador	H-Donador (Oxígeno)	Aminoácido	Átomo donador	H-Aceptor	Aminoácido	Átomo aceptor	Distancia D-Aceptor	Distancia D-H-Aceptor
VAL	640	N	MET	685	O	VAL	640	H1	5.870	5.222
VAL	640	N	THR	687	O	VAL	640	H1	2.552	1.795
LYS	642	N	MET	685	O	LYS	642	H	3.090	2.174
LEU	644	N	ASN	683	O	LEU	644	H	2.869	1.909
LEU	644	N	SER	684	OG	LEU	644	H	4.911	4.151
GLY	680	N	GLU	682	O	GLY	680	H2	4.637	3.909
GLU	682	N	GLY	680	O	GLU	682	H	3.234	2.850
ASN	683	N	LEU	644	O	ASN	683	H	3.791	2.875
ASN	683	N	ASP	645	O	ASN	683	H	5.855	4.858
ASN	683	ND2	LEU	644	O	ASN	683	HD22	5.519	4.961
ASN	683	ND2	ASP	645	O	ASN	683	HD22	5.801	5.051
SER	684	N	ASN	683	OD1	SER	684	H	4.886	4.580
MET	685	N	LYS	642	O	MET	685	H	3.123	2.143
THR	687	N	VAL	640	O	THR	687	H	3.748	2.848

Tabla.Sup.1 Enlaces de hidrógeno en la enzima TYK2 wild type y TYK2 I684S

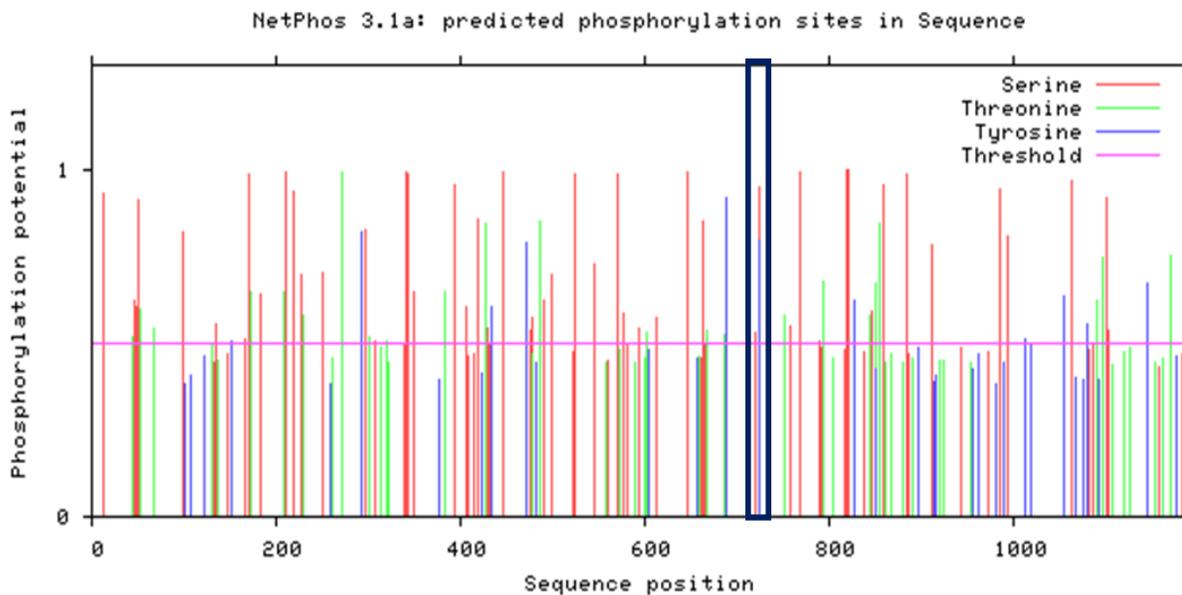


A

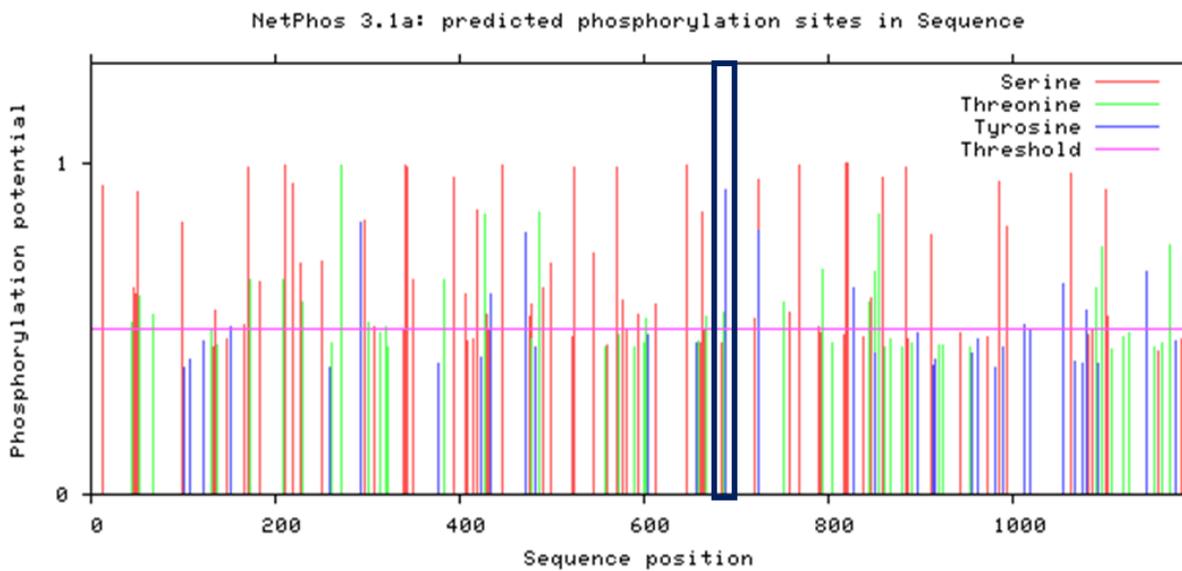


B

Fig.Sup.4. Diagramas de superficie de TYK2 wild type y TYK2 Ile684Ser: A) Superficie de densidad para la enzima TYK2 (Izquierda) con el modelo Pseudoquinasa1 (violeta) y para el modelo de mutación Ile684Ser (Derecha) con el modelo Pseudoquinasa1 (Naranja), los otros dominios se reportan con su ID en el Protein Data Bank; B) Mapa de potencial electrostático para el ion fosfato sólido (Izquierda) y potencial electrostático del ion fosfato en transparencia (Derecha).



A



B

FigSup.5. *Patrones de fosforilación in silico con el software NetphosK 3.1: A) Patrones de fosforilación para la enzima TYK2 nativa; B) Patrones de fosforilación para la enzima TYK2 mutada I684S, señalando en el recuadro negro la región de fosforilación.*