

AULA PRÁTICA 1.2

VISUALIZAÇÃO E REPRESENTAÇÃO MOLECULAR

Nos exercícios abaixo vocês utilizarão o programa PyMOL para visualizar e representar estruturas moleculares de proteínas. As perguntas devem ser respondidas neste mesmo documento. Cada grupo realizará o exercício com um arquivo *.pdb* específico indicado. Ao final da aula enviem um arquivo *.pdf* com as respostas via e-mail para: rvcguido@usp.br. Nomeie o arquivo com as respostas da seguinte maneira: **BME2023_P1_GX.pdf** (substitua o "X" pelo no. do grupo, ou seja, 1, 2, 3, ...)

NOMES: Lucca Ribeiro Paulino - 11212060

EXERCÍCIOS

1. Acesse o site do *Protein Data Bank* e baixe o arquivo *.pdb* de acordo com seu grupo:

Grupo	1	2	3	4	5	6	7	8
PDB ID	1MEM	2BIW	2CYP	2OZ5	3DMT	3HEC	4B4U	5CGC

Várias informações críticas estão disponíveis na página da proteína no *Protein Data Bank*. Responda:

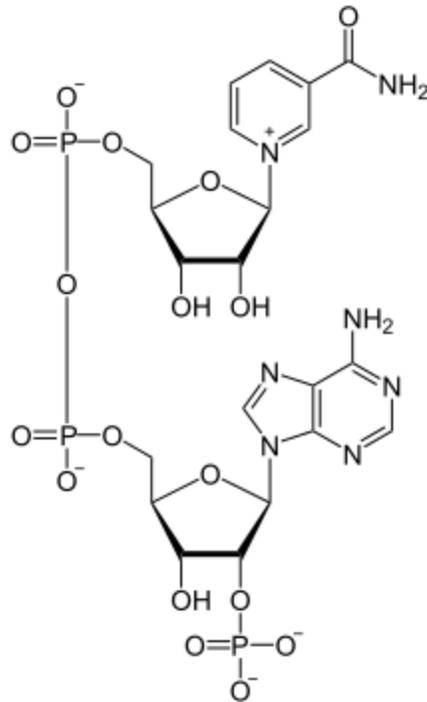
Qual é o nome da proteína? Qual o comprimento desta proteína (o número de resíduos)? Qual a classificação desta proteína? Qual o organismo de origem da proteína?

A proteína é chamada N5, N10- methylenetetrahydrofolate dehydrogenase-cyclohydrolase (FOLD), possui 303 resíduos de aminoácido, é classificada como uma oxirredutase e provém do organismo *Acinetobacter baumannii*.

Qual o método experimental utilizado para a determinação da estrutura? Qual é a resolução e grupo espacial desta estrutura? Há ligantes em complexo com a proteína? Em caso afirmativo, inclua uma figura 2D para cada um dos ligantes?

O método experimental utilizado na determinação da estrutura foi a difração de raio-X com resolução de 1.45 Å. Seu grupo espacial é P 1 2₁ 1.

O ligante NADP está complexado com a proteína.



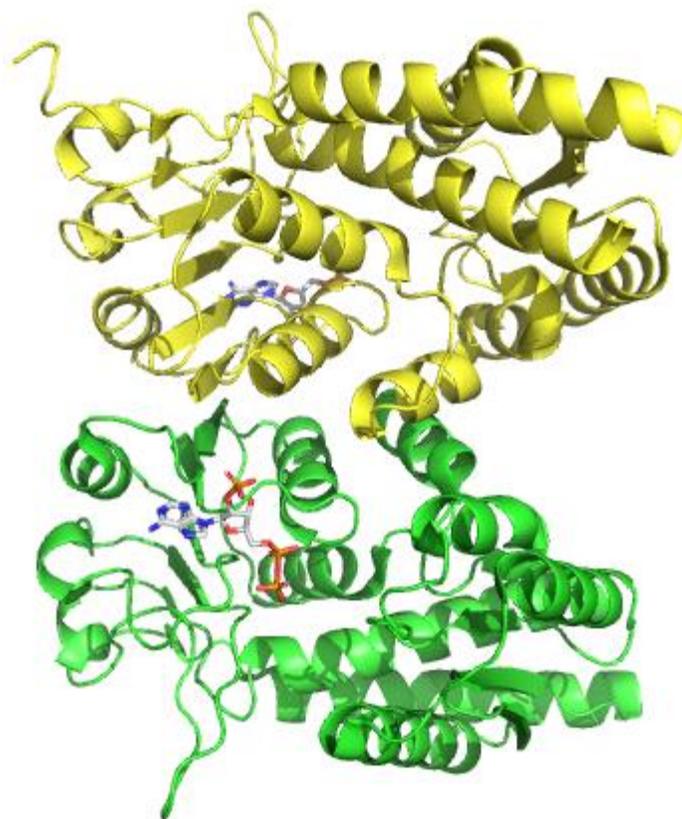
Indique a referência completa para o artigo que descreve as características estruturais da proteína (ex: Vonrhein, C., Schulz, G.E. The structure of a trimeric archaeal adenylate kinase. *J. Mol. Biol.* 282, 167-179, **1998**)

Eadsforth TC, Maluf FV, Hunter WN. Acinetobacter baumannii FOLD ligand complexes --potent inhibitors of folate metabolism and a re-evaluation of the structure of LY374571. *FEBS J.* 2012 Dec;279(23):4350-60. doi: 10.1111/febs.12025. Epub 2012 Nov 5. PMID: 23050773; PMCID: PMC3655515.

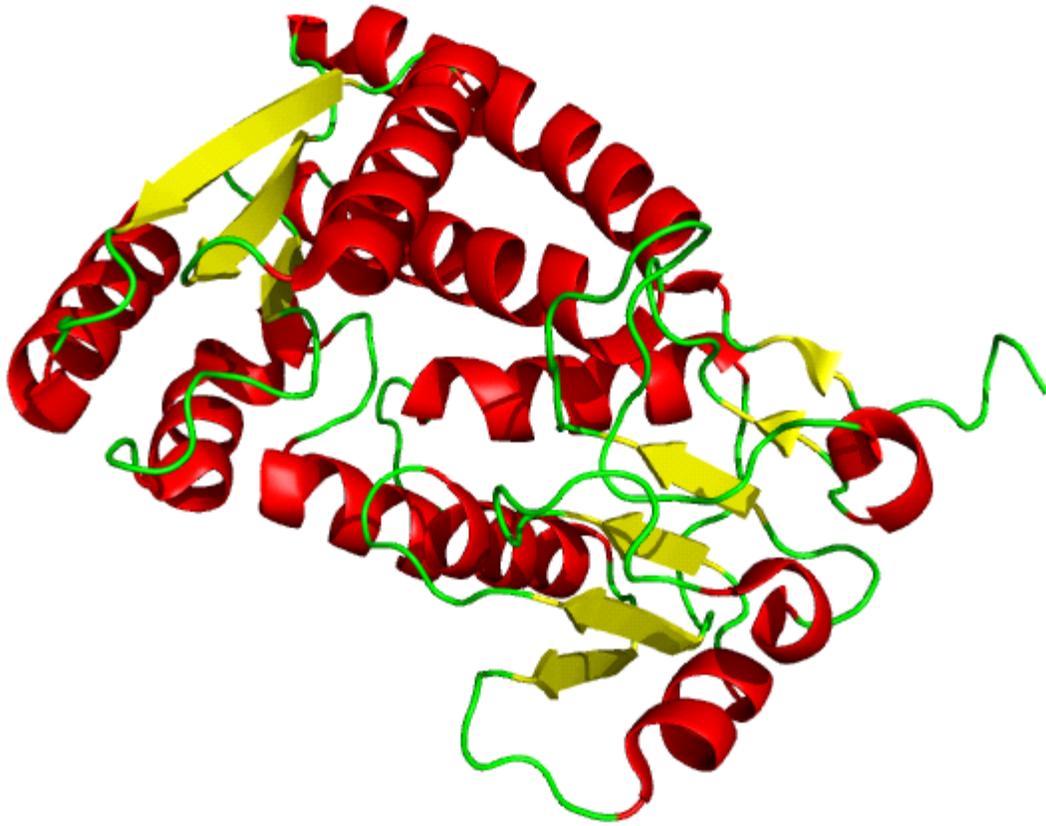
2. Carregue o arquivo .pdb respectivo do seu grupo no PyMOL e responda:

Qual o estado oligomérico desta proteína? Faça uma figura representativa em modelo *cartoon* destacando os monômeros em cores diferentes (se houver).

A proteína está em estado de dímero



Faça uma figura representativa em modelo *cartoon* do monômero de sua proteína destacando os elementos de estrutura secundária (hélice- α = vermelho; folhas- β = amarelo; alças = verde).

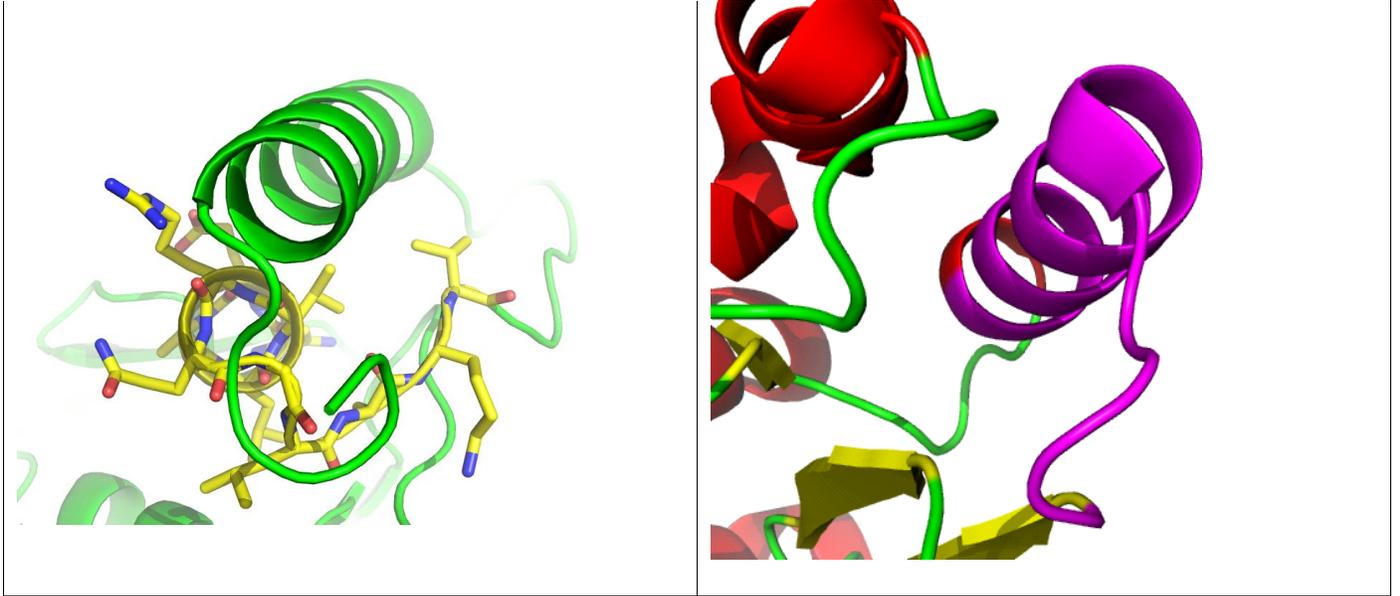


Os resíduos localizados nas posições 70–80 da cadeia polipeptídica do seu arquivo *.pdb* pertencem a qual elemento de estrutura secundária?

Os resíduos localizados nas posições 70-80 da cadeia polipeptídica pertencem a uma hélice alpha e a uma alça.

Faça uma figura destacando os resíduos localizados nas posições 70–80 da cadeia polipeptídica como no modelo abaixo.

Exemplo	Exercício
---------	-----------

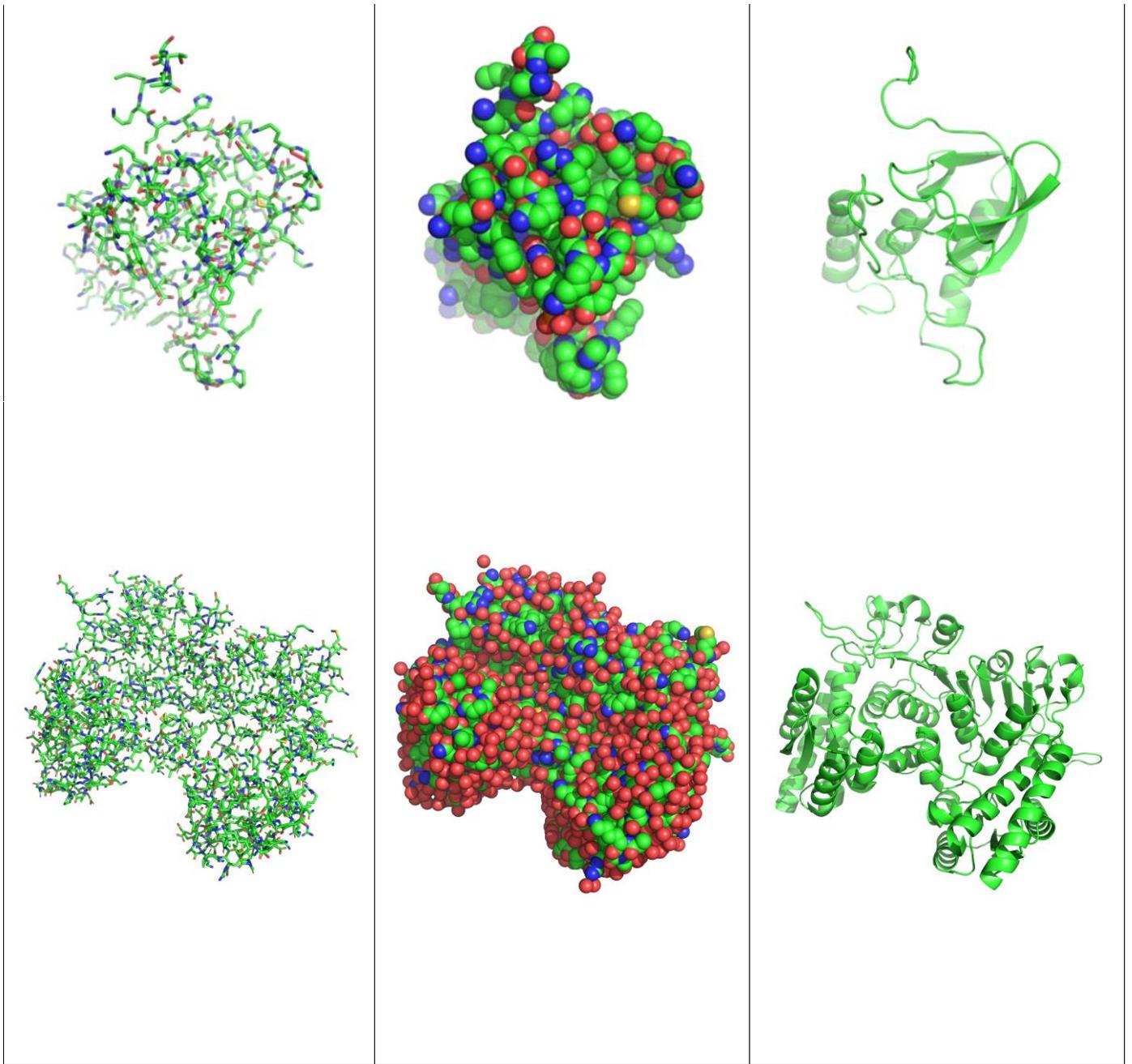


Preencha a tabela abaixo com as informações dos resíduos 70–80 da cadeia polipeptídica do seu arquivo *.pdb*.

	70	71	72	73	74	75	76	77	78	79	80
Código 1 letra	P	Q	E	T	T	T	E	Q	L	L	A
Código 3 letras	Pro	Gln	Glu	Thr	Thr	Thr	Glu	Gln	Leu	Leu	Ala
Característica	Apolar	Polar	Carregados -	Polar	polar	Polar	Carregados -	Polar	Apolar	Apolar	Apolar

Faça três figuras representativas da proteína no seu arquivo *.pdb* semelhantes aos exemplos abaixo. Insira as figuras nos espaços reservados. Insira as figuras nos espaços reservados.

Bastões	Esferas (CPK)	Cartoon
---------	---------------	---------



Faça duas figuras representativas do complexo contido no seu arquivo *.pdb* semelhantes aos exemplos abaixo. Insira as figuras nos espaços reservados.

Exemplo

Exercícios

