

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, ...)

NOME: Bruno Rafael Florentino

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?

Nome: Cathepsin K

Comprimento: 215 bases

Classificação: hydrolase / hydrolase inhibitor

Organismo de origem: homo sapiens

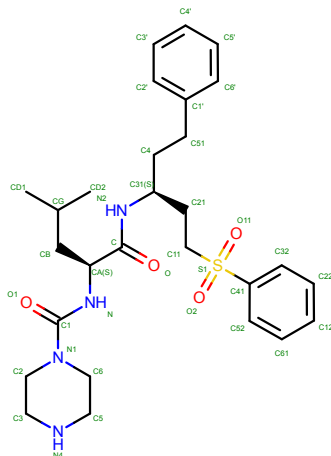
Qual o método experimental utilizado para a determinação da estrutura? Qual é a resolução e grupo espacial desta estrutura? Há ligantes em complexo com a proteína? Em caso afirmativo, inclua uma figura 2D para cada um dos ligantes?

Método: X-RAY DIFFRACTION

Resolução: 1.80 Å

Space Group: P 2₁ 2₁ 2₁

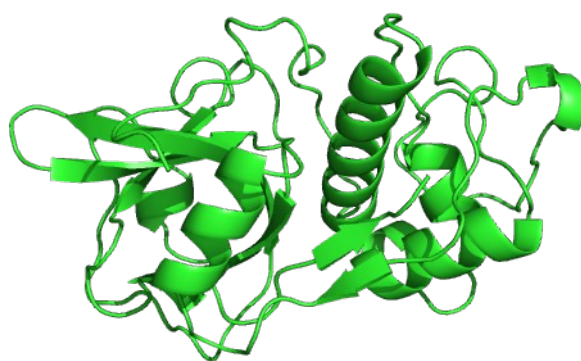
Existe o ligante N-{(1R)-3-phenyl-1-[2-(phenylsulfonyl)ethyl]propyl}-N~2~-(piperazin-1-ylcarbonyl)-L-leucinamide



McGrath, M., Klaus, J., Barnes, M. *et al.* Crystal structure of human cathepsin K complexed with a potent inhibitor. *Nat Struct Mol Biol* **4**, 105–109 (1997). <https://doi.org/10.1038/nsb0297-105>

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).



Estado oligomérico: monômero

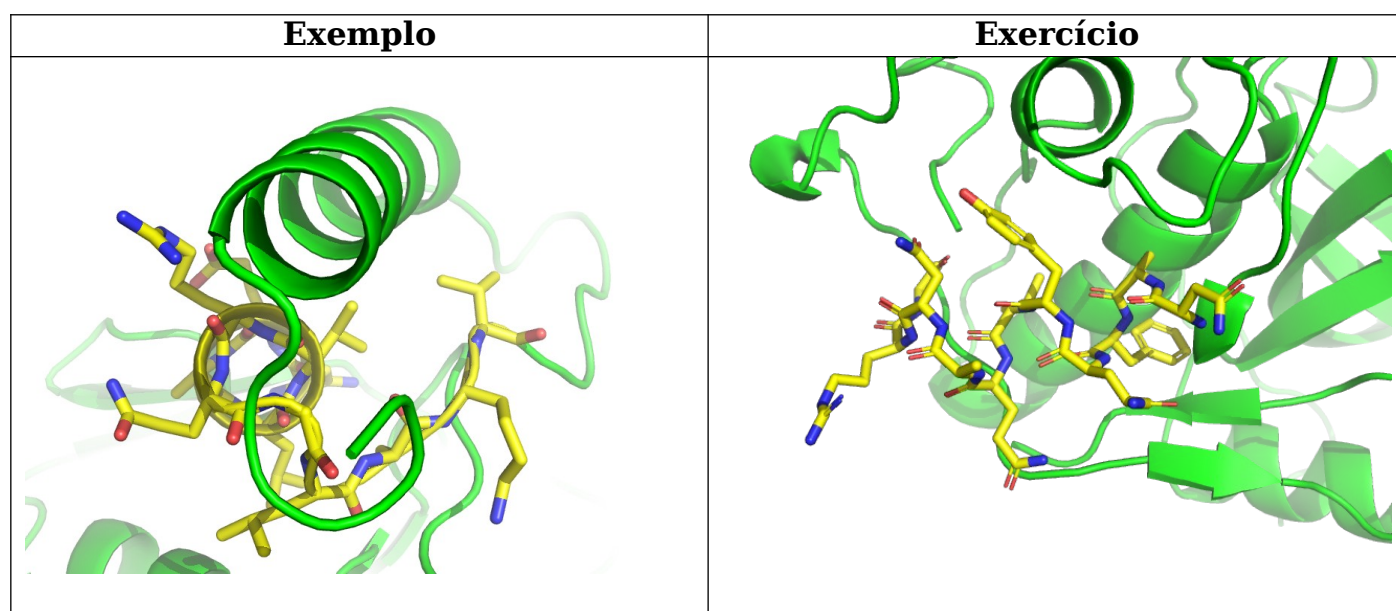
Faça uma figura representativa em modelo *cartoon* do monômero de sua proteína destacando os elementos de estrutura secundária (hélice- α = vermelho; folhas- β = amarelo; alças = verde).



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

Majoritariamente a uma hélice alfa e uma pequena parte a voltas

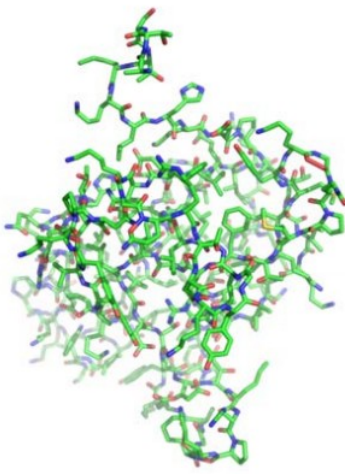
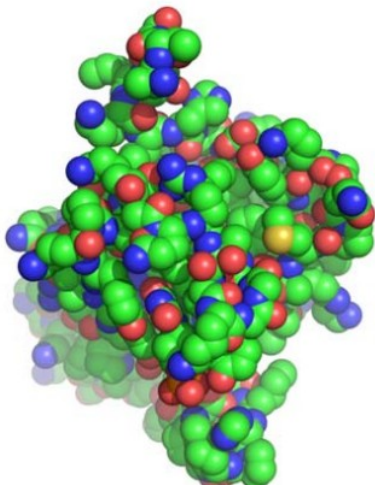

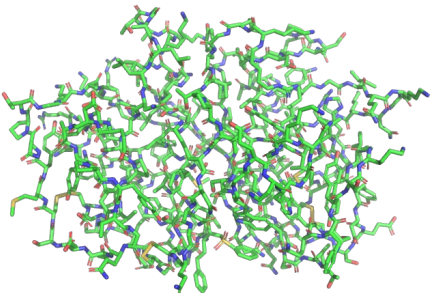
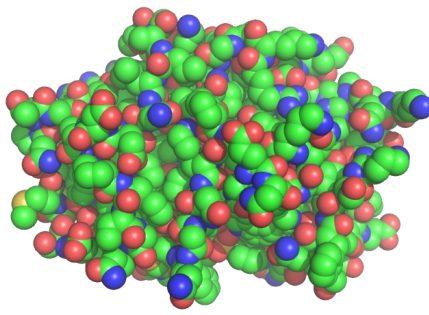
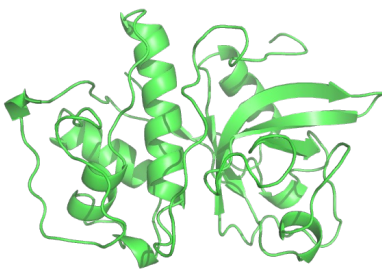
Faça uma figura destacando os resíduos localizados nas posições 70–80 da cadeia polipeptídica como no modelo abaixo.



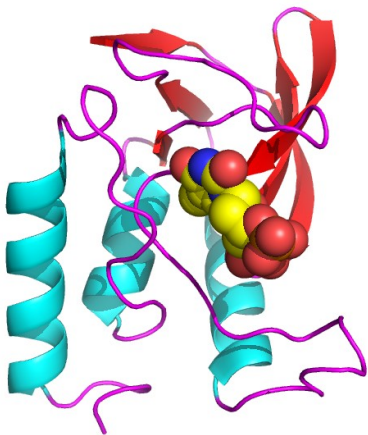
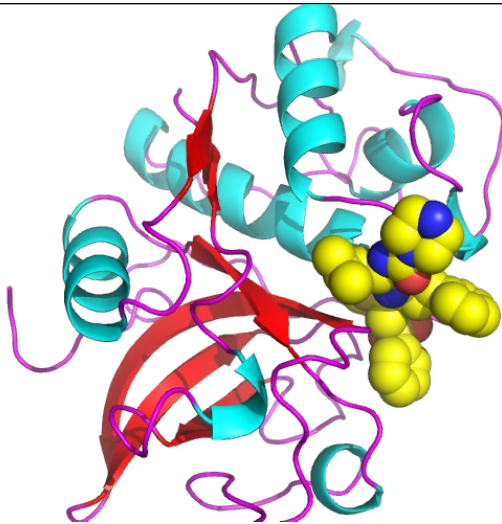
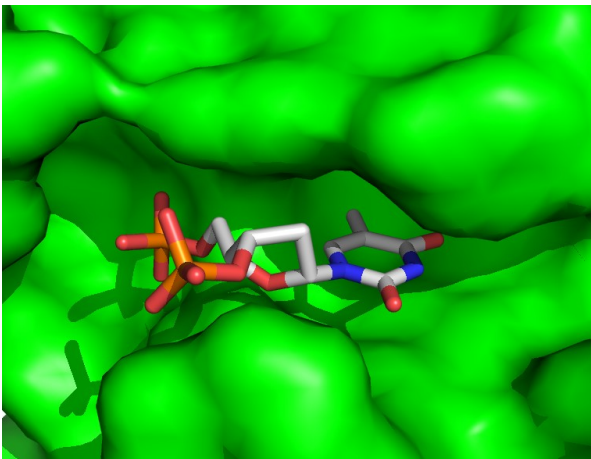
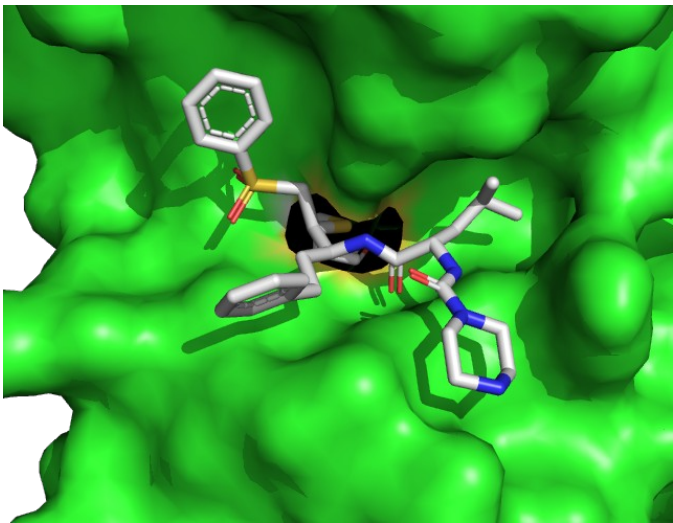
Preencha a tabela abaixo com as informações dos resíduos 70-80 da cadeia polipeptídica do seu arquivo *.pdb*.

	70	71	72	73	74	75	76	77	78	79	80
Código 1 letra	N	A	F	Q	Y	V	Q	K	N	R	G
Código 3 letras	Asn	Ala	Phe	Gln	Tyr	Val	Gln	Lys	Asn	Arg	Gly
Característica	Polar	Apol ar	Aro máti co	Polar	Aro máti co	Apol ar	Polar	Carre gado +	Polar	Carre gado +	Apol ar

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
 <p>A ribbon diagram of a protein complex. The protein is shown in cyan and magenta. A ligand, consisting of a yellow and red structure, is bound to the protein.</p>	 <p>A ribbon diagram of a protein complex. The protein is shown in cyan and magenta. A ligand, consisting of a yellow and red structure, is bound to the protein.</p>
 <p>A surface representation of a protein complex. The protein is shown in green. A ligand, consisting of a yellow and red structure, is bound to the protein.</p>	 <p>A surface representation of a protein complex. The protein is shown in green. A ligand, consisting of a yellow and red structure, is bound to the protein.</p>