

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: Rodrigo Sena, 11832194

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:

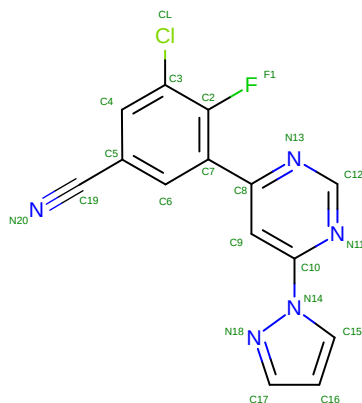
Qual é o nome da proteína? Qual o comprimento desta proteína (o número de resíduos)? Qual a classificação desta proteína? Qual o organismo de origem da proteína?

A proteína se chama metabotropic glutamate receptor 5, possui uma sequência com 444 aminoácidos, é da classe C das GPCR humanas.

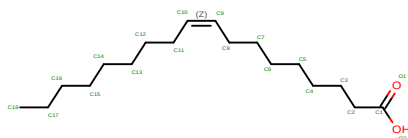
Qual o método experimental utilizado para a determinação da estrutura? Qual é a resolução e grupo espacial desta estrutura? Há ligantes em complexo com a proteína? Em caso afirmativo, inclua uma figura 2D para cada um dos ligantes?

O método experimental utilizado foi a difração de raio-x, sua resolução é de 3.10 Å e o grupo espacial é C 1 2 1. Há 3 ligantes em complexo com a proteína:

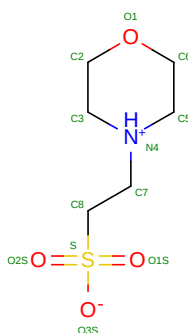
1 - 3-chloro-4-fluoro-5-[6-(1H-pyrazol-1-yl)pyrimidin-4-yl]benzonitrile



2 - OLEIC ACID



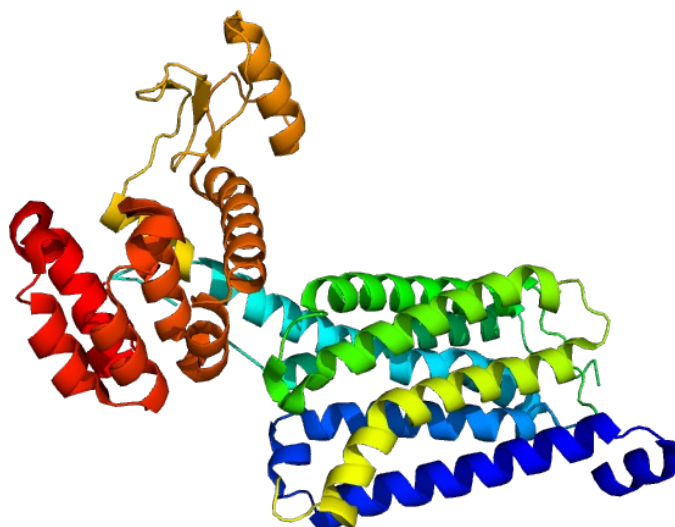
3 - 2-(N-MORPHOLINO)-ETHANESULFONIC ACID



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 em questão é um monômero



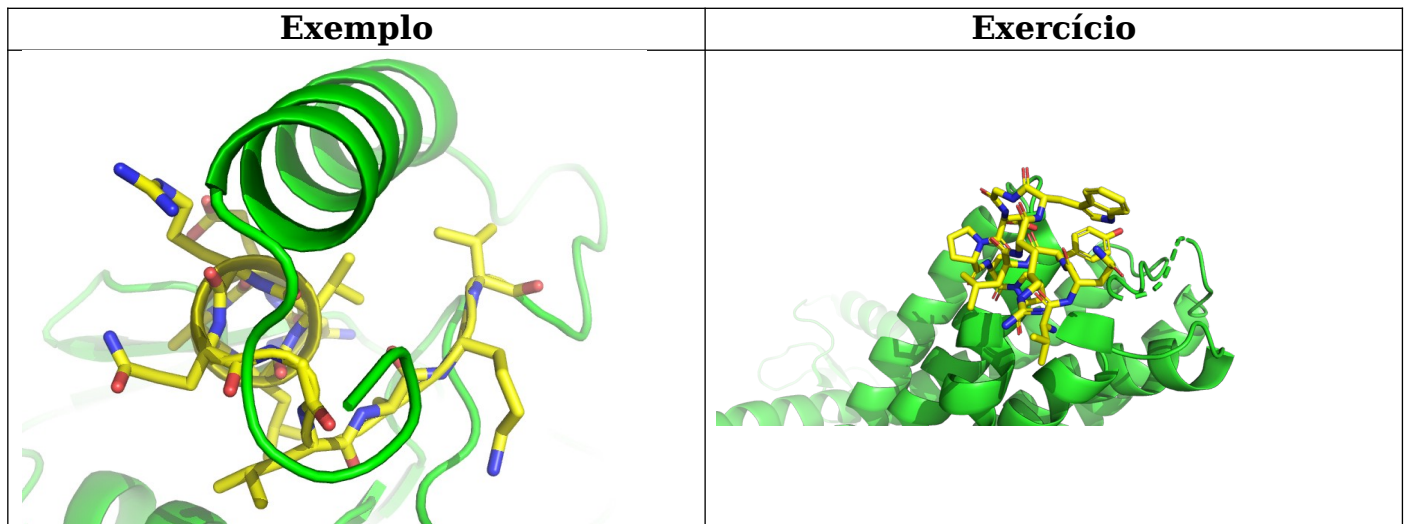
Faça uma figura representativa em modelo *cartoon* do monômero de sua proteína destacando os elementos de estrutura secundária (hélice- α = vermelho; folhas- β = amarelo; alças = verde).



Os resíduos localizados nas posições 570–580 da cadeia polipeptídica do seu arquivo *.pdb* pertencem a qual elemento de estrutura secundária?

Esses resíduos pertencem a hélice- α

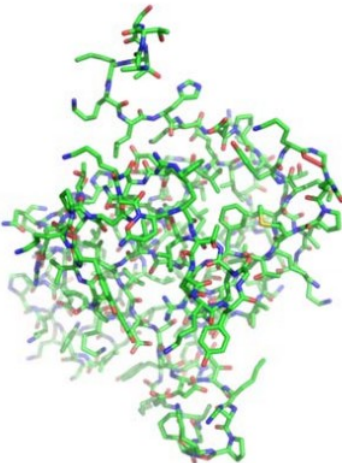
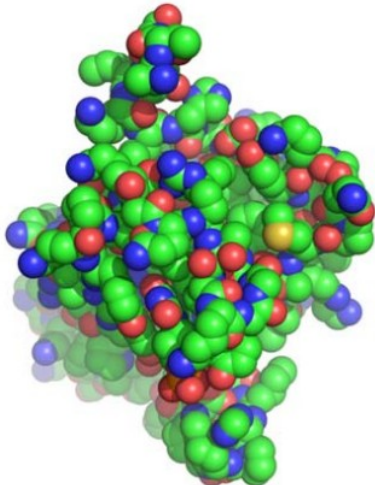
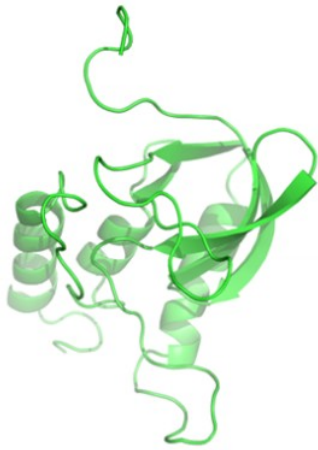
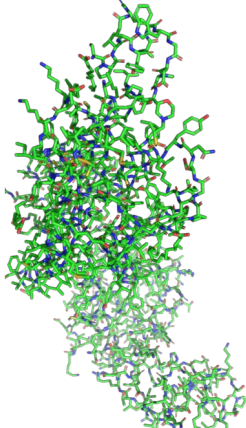
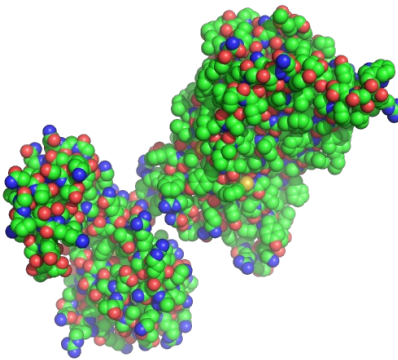
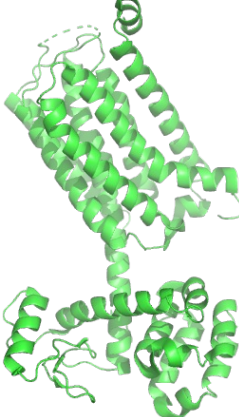
Faça uma figura destacando os resíduos localizados nas posições 570-580 da cadeia polipeptídica como no modelo abaixo.



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	V	Q	Y	L	R	W	G	D	P	A	P
Código 3 letras	VAL	GLN	TYR	LEU	ARG	TRP	GLY	ASP	PRO	ALA	PRO
Característica	Apolar	Polar	Aromático	Apolar	Básico	Aromático	Apolar	Ácido	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
