

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: Natália de Carvalho Santos (11878038)

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 da proteína: APOCAROTENOID-CLEAVING OXYGENASE

Comprimento da Proteína: 490

Classificação da Proteína: OXIDOREDUCTASE

Organismo de origem da proteína: *Synechocystis* sp. PCC 6803

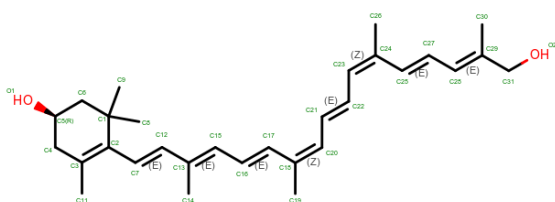
Qual o método experimental utilizado para a determinação da estrutura? Qual é a resolução e grupo espacial desta estrutura? Há ligantes em complexo com a proteína? Em caso afirmativo, inclua uma figura 2D para cada um dos ligantes?

Método experimental: X-RAY DIFFRACTION

Resolução: 2.39 Å

Grupo espacial: P 21 21 21

Ligantes: Sim, há dois ligantes, o (3R)-3-HYDROXY-8'-APOCAROTENOL e FE (III) ION (respectivamente)



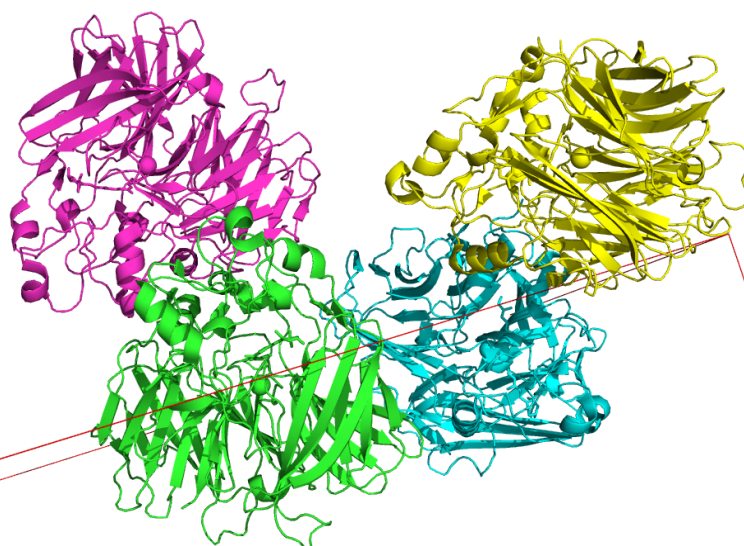
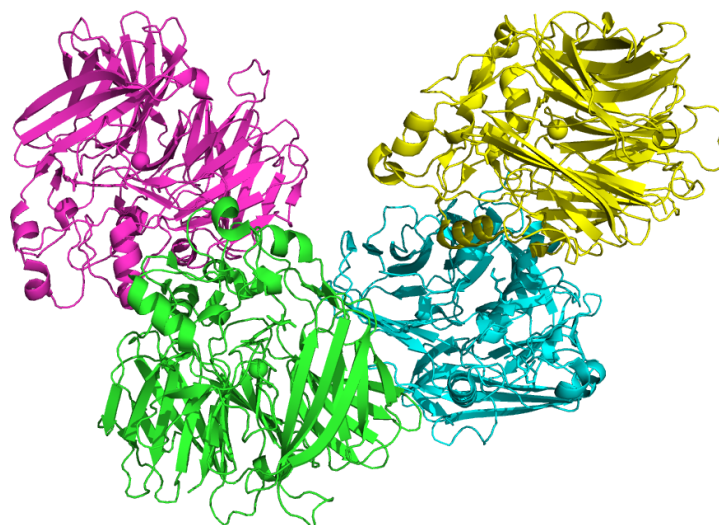
Indique a referência completa para o artigo que descreve as características estruturais da proteína (ex: Vonrhein, C., Schulz, G.E. The structure of a trimeric archaeal adenylate kinase. *J. Mol. Biol.* 282, 167-179, **1998**)

Daniel P. Klover et al. , The Structure of a Retinal-Forming Carotenoid Oxygenase. *Science* 308, 267-269 (2005). DOI:10.1126/science.1108965

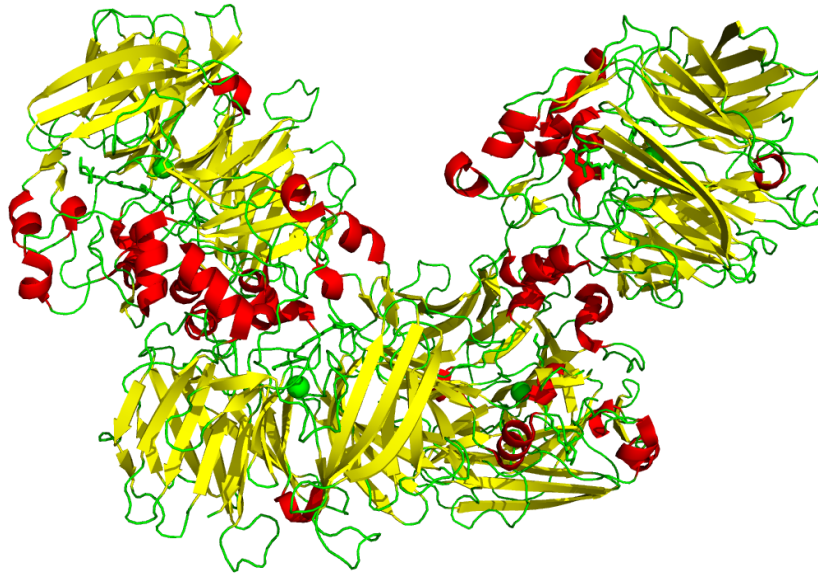
2. Carregue o arquivo .pdb respectivo do seu grupo no PyMOL e responda:

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

Temos 4 monômeros que formam dímeros, bem provável que os dímeros funcionais sejam o azul (ciano) e o verde, isso porque eles se encontram dentro da cell (como mostrado na segunda figura).



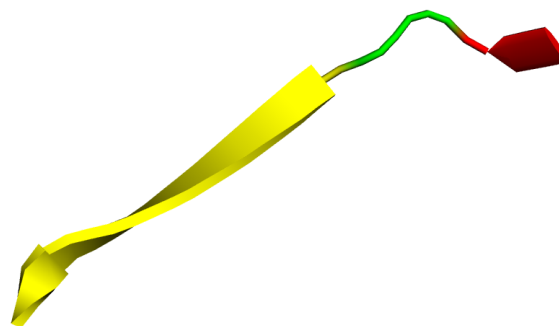
Faça uma figura representativa em modelo *cartoon* do monômero de sua proteína destacando os elementos de estrutura secundária (hélice- α = vermelho; folhas- β = amarelo; alças = verde).



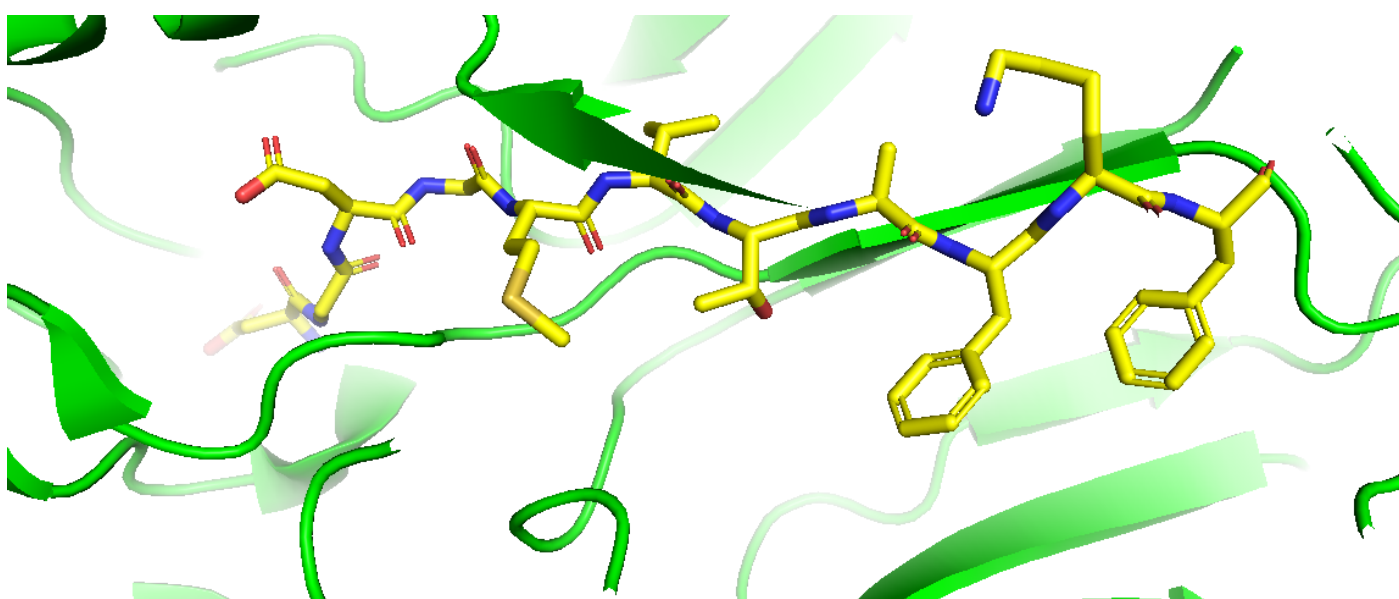
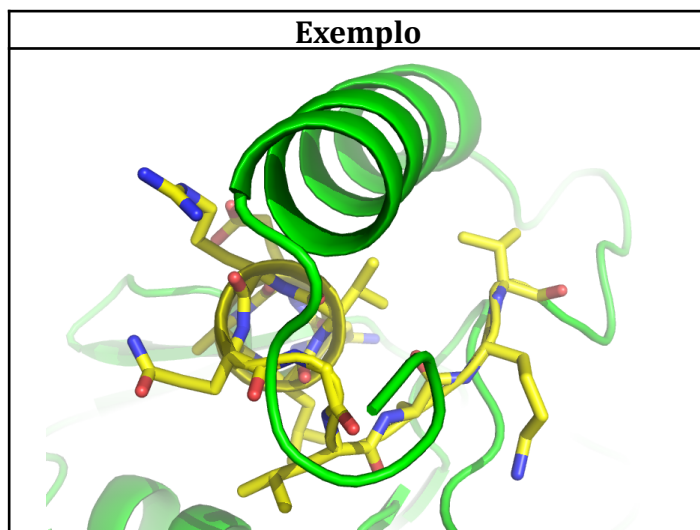
Os resíduos localizados nas posições 70–80 da cadeia polipeptídica do seu arquivo *.pdb* pertencem a qual elemento de estrutura secundária?

Os resíduos 70, 71 fazem parte da hélice- α (mostrados em vermelho), já os resíduos 72, 73 fazem parte da alça (mostrados em verde), e os resíduos 74 - 80 fazem parte da folhas- β (mostrado em amarelo)

DGDGMVTAFKF



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



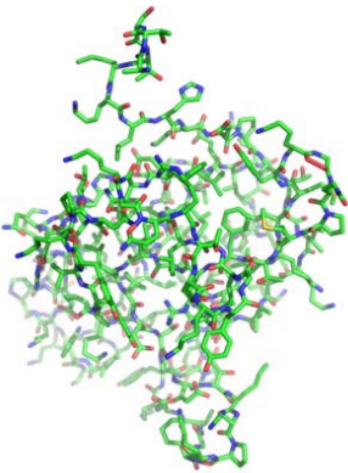
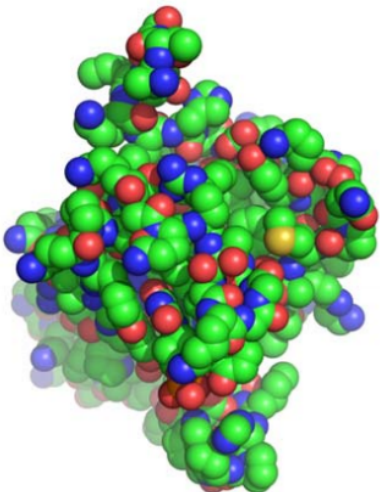

Preencha a tabela abaixo com as informações dos resíduos 70–80 da cadeia polipeptídica do seu arquivo *.pdb*.

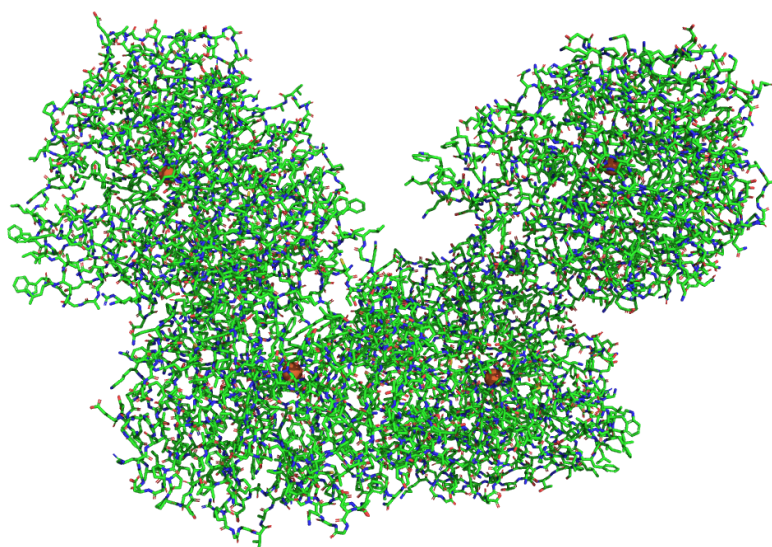
	70	71	72	73	74	75	76	77	78	79	80
Código 1 letra	D	G	D	G	M	V	T	A	F	K	F
Código 3 letras	Asp	Gly	Asp	Gly	Met	Val	Thr	Ala	Phe	Lys	Phe
Característica	C-	A	C-	A	A	A	P	A	Ar	C+	Ar

Legenda:

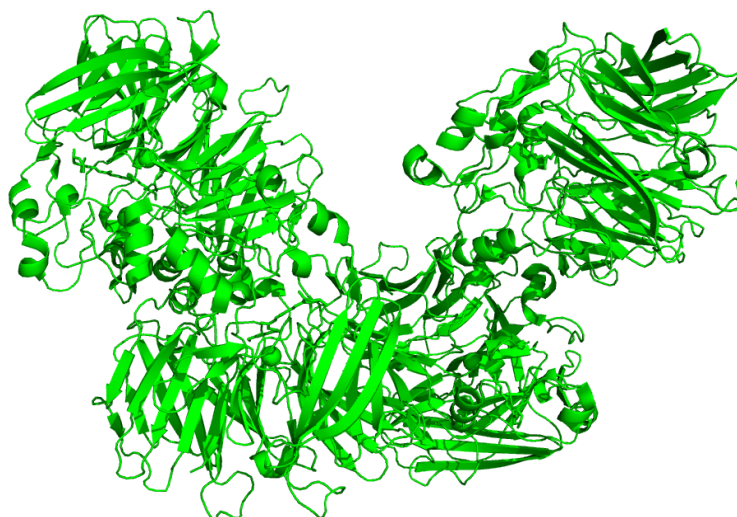
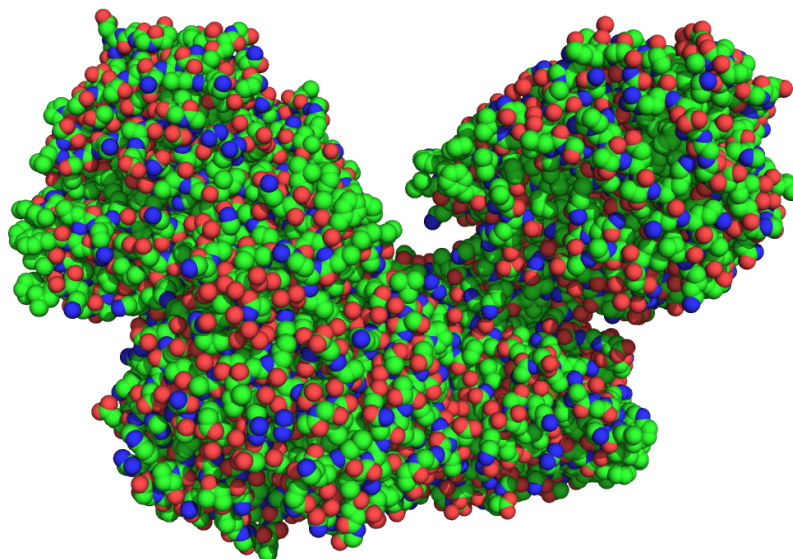
- A : Apolar
- C- : Carregado negativamente
- C+ : Carregado positivamente
- P: Polar
- Ar: Aromático

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.

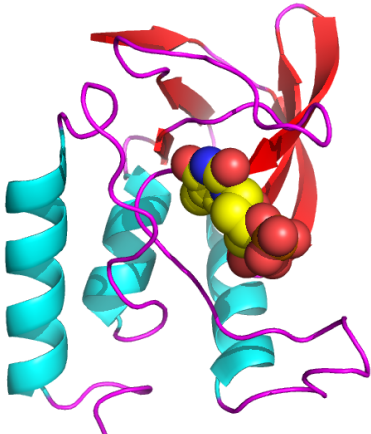
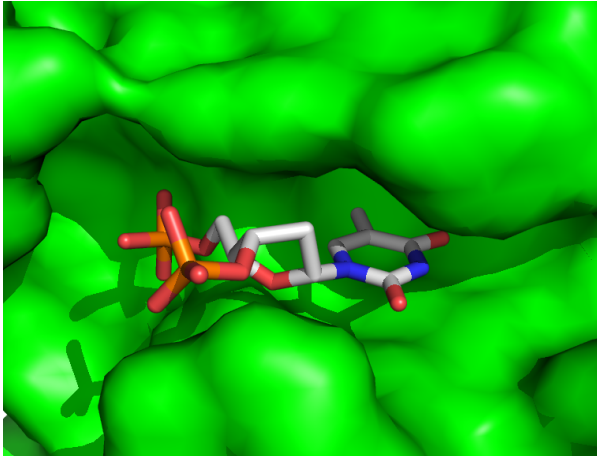
Bastões	Esferas (CPK)	<i>Cartoon</i>
		

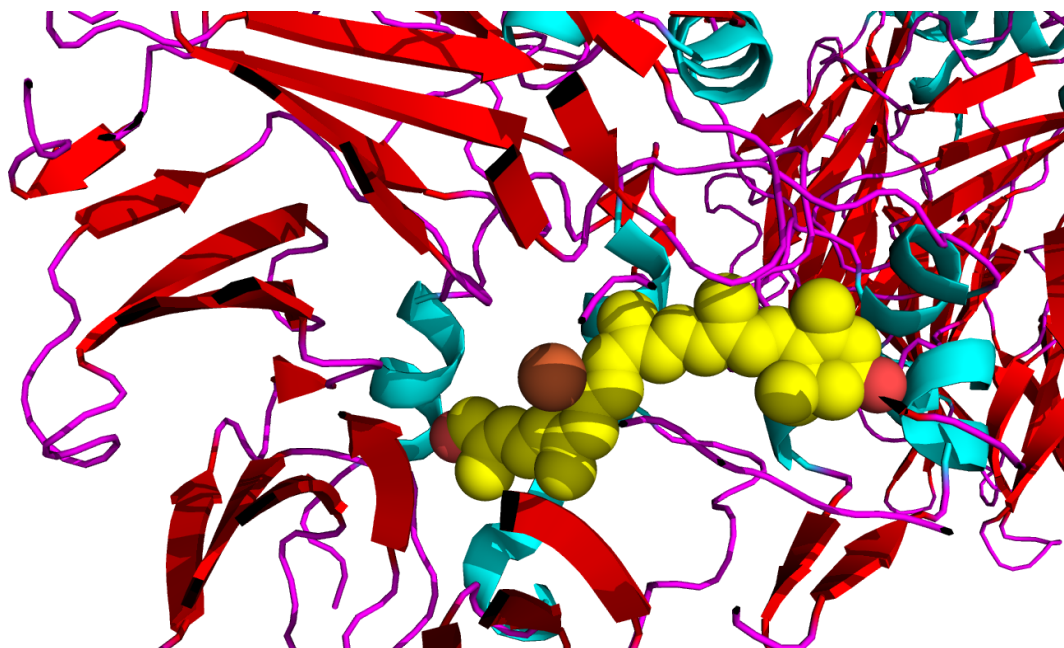


Prof. Dr. Rafael V. C. Guido / Prof. Dr. Andre Ambrosio

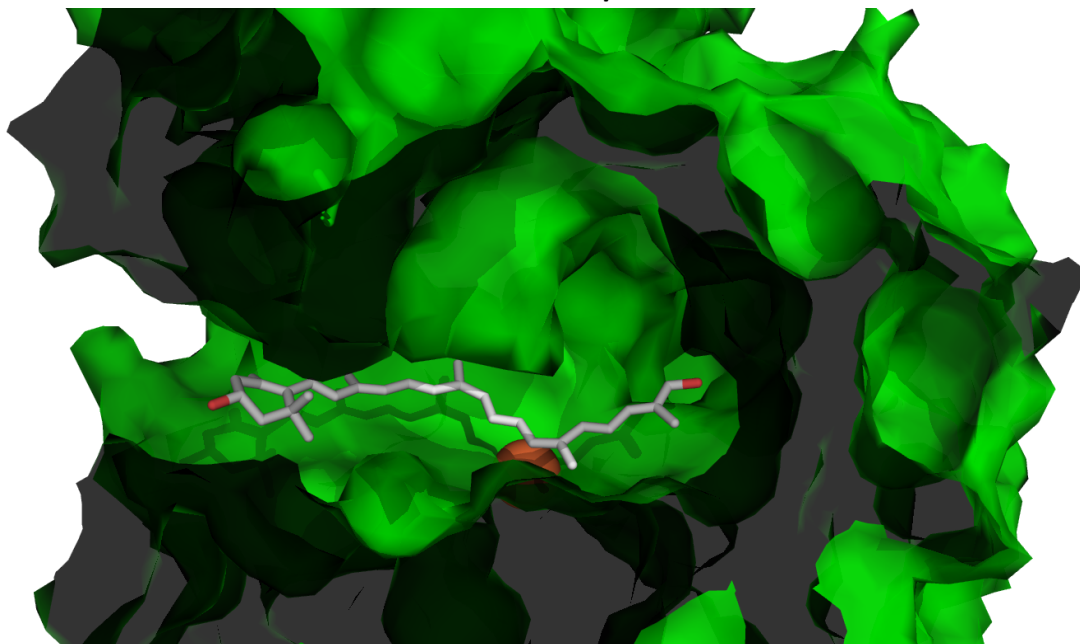


Faça duas figuras representativas do complexo contido no seu arquivo *.pdb* semelhantes aos exemplos abaixo. Insira as figuras nos espaços reservados.

Exemplo	Exemplo
	



Prof. Dr. Rafael V. C. Guido / Prof. Dr. Andre Ambrosio



For Educational Use Only

