**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](mailto:rvcguido@usp.br). Nomeie o arquivo com as respostas da seguinte maneira: **BME2023\_P1\_GX.pdf** (substituta o “X” pelo no. do grupo, ou seja, 1, 2, 3, ...)

**NOME: Willian dos Santos Ribela**

**EXERCÍCIOS**

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

|  |  |
| --- | --- |
| **Grupo** | **3** |
| **PDB ID** | 2CYP |

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?

Citocromo C Peroxidase

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 utilizado foi difração por raio x. A resolução foi 1.70 Å. O grupo espacial da estrutura é [P 2](https://www.rcsb.org/search?q=symmetry.space_group_name_H_M:P 21 21 21)1 21 21.

**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).

Monômero. Visto que a última sequência da proteína é composta de 0 e após essa sequência não aparecer mais nenhuma sequência.



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?

Dos resíduos 70-72 pertencem a uma alça.

Dos resíduos 73-78 pertencem a uma hélice.

Dos resíduos 79-80 pertencem 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** | T | Y | R | F | K | K | E | F | N | D | P |
| **Código 3 letras** | Thr | Tyr | Arg | Phe | Lyss | Lys | Glu | Phe | Asn | Asp | Pro |
| **Característica** | Polar | Aromático | Carregado + | Aromático | Carregado + | Carregado + | Carregado - | Aromático | Polar | Carregado - | 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** |
|  |  |
|  |  |