

AULA PRÁTICA 2

HÉLICES EM PROTEÍNAS

Orientações:

- ☒ Nos exercícios desta aula vocês utilizarão modelos atômicos de aminoácidos para estudar estruturas de hélices em proteínas.
- ☒ As perguntas devem ser respondidas neste mesmo documento.
- ☒ Cada grupo receberá uma caixa com peças suficientes (i.e., C=O; NH; H; cadeia lateral) para montar 40 resíduos de aminoácidos.
- ☒ 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_P2_GX.docx** (substitua o “X” pelo no. do grupo, ou seja, 1, 2, 3, ...)

Natália de Carvalho Santos - nºUSP: 11878038

α -hélice é uma estrutura secundária cuja conformação em espiral posiciona o grupo C=O do resíduo n da cadeia polipeptídica em geometria favorável para receber ligação de hidrogênio do grupo NH do resíduo localizado quatro posições a frente ($n + 4$) na cadeia polipeptídica (Figura 1).

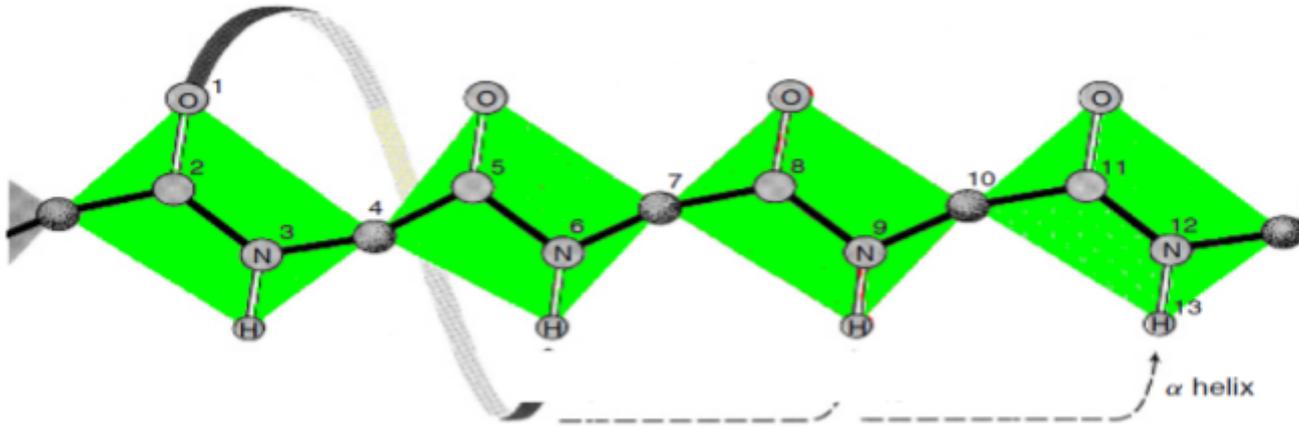


Figura 1. Padrão de ligação de hidrogênio em α -hélice.

Exercício 1

Utilizar os modelos atômicos de aminoácidos para montar uma α -hélice com 12 resíduos de acordo com a estrutura primária (Figura 2).

Estrutura Primária:

9-GKEISAQIRARL-20

Características α -hélice

Ligação de H = $n - n+4$

Período = 3,6 aa/volta

$\Phi = -47^\circ$

$\Psi = -57^\circ$

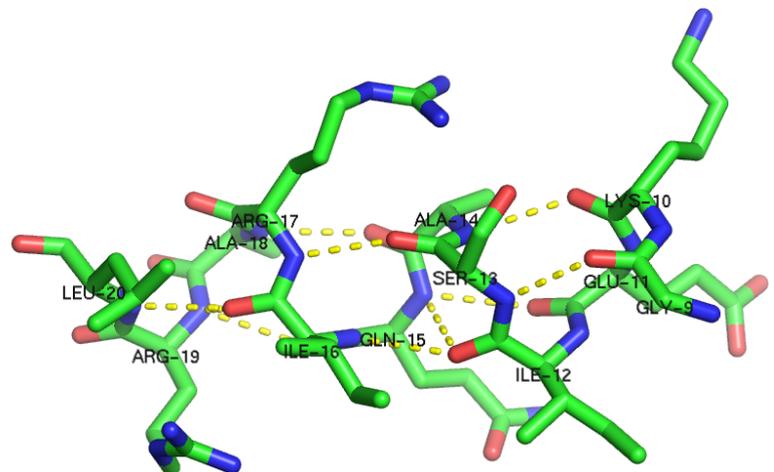
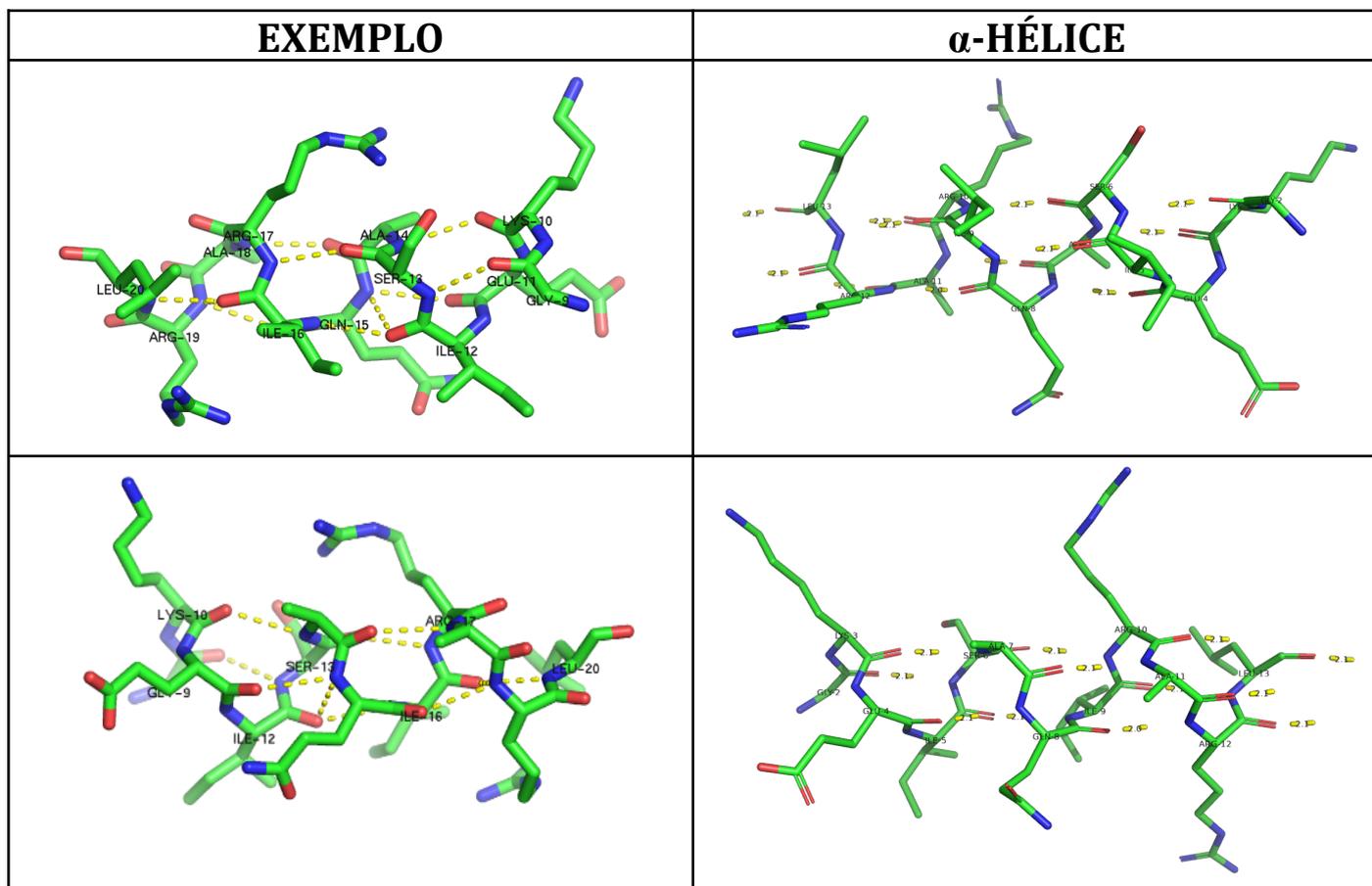
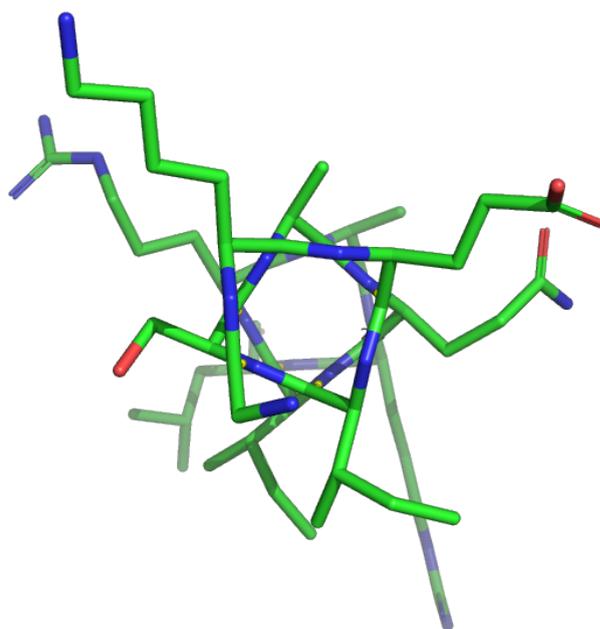
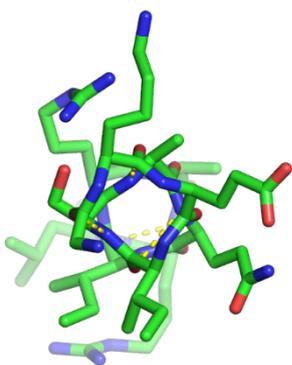
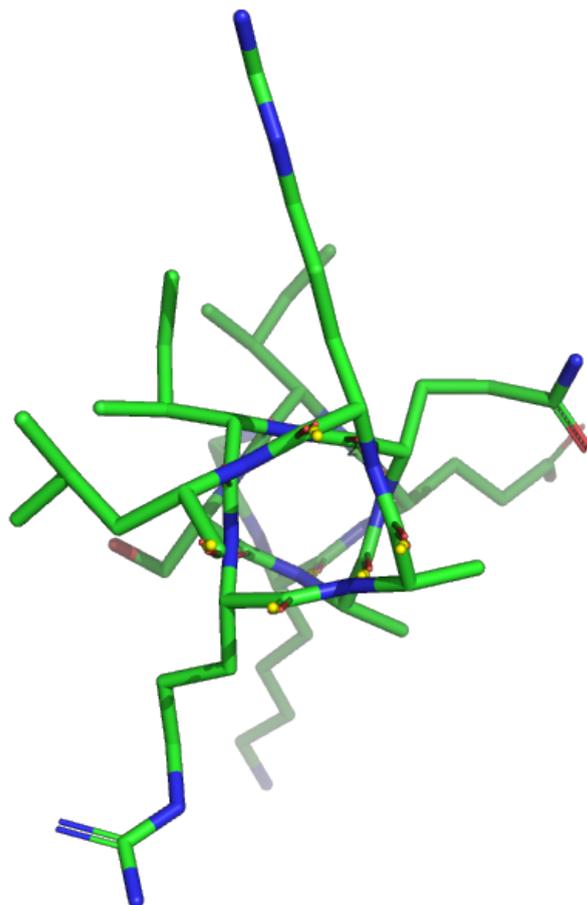
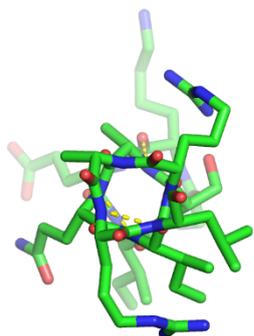


Figura 2. Exemplo de α -hélice.

Obs: os ângulos estão invertidos, no caso do ângulo Ψ (psi) no pymol o ângulo é 133 graus





Hélice 3_{10} é uma estrutura secundária cuja conformação em espiral posiciona o grupo C=O do resíduo n da cadeia polipeptídica em geometria favorável para receber ligação de hidrogênio do grupo NH do resíduo localizado três posições a frente ($n + 3$) na cadeia polipeptídica (Figura 3).

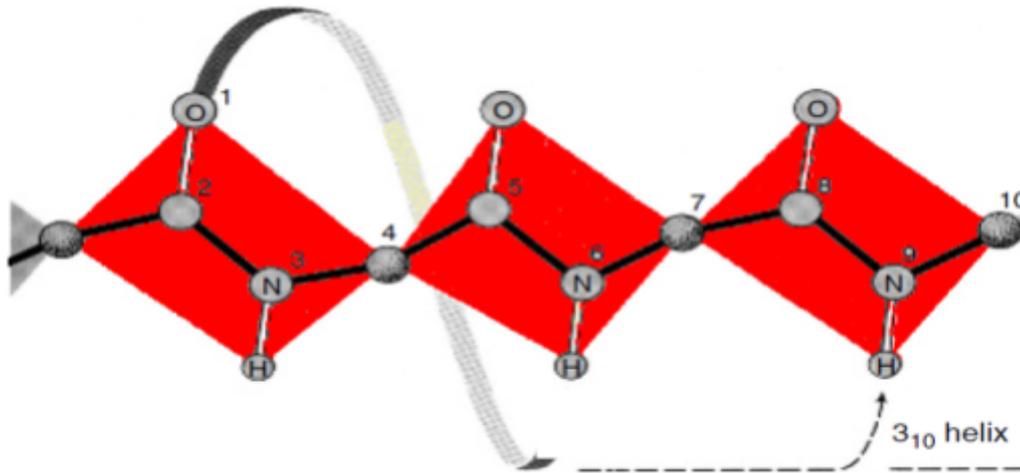


Figura 3. Padrão de ligação de hidrogênio em hélice 3_{10} .

Exercício 2

Utilizar os modelos atômicos de aminoácidos para montar uma hélice 3_{10} com 10 resíduos de acordo com a estrutura primária (Figura 4)

Estrutura Primária:

515-LDQLRKLLSY-524

Características hélice 3_{10}

Ligação de H = $n - n+3$

Período = 3,0 aa/volta

$\Phi = -49^\circ$

$\Psi = -26^\circ$

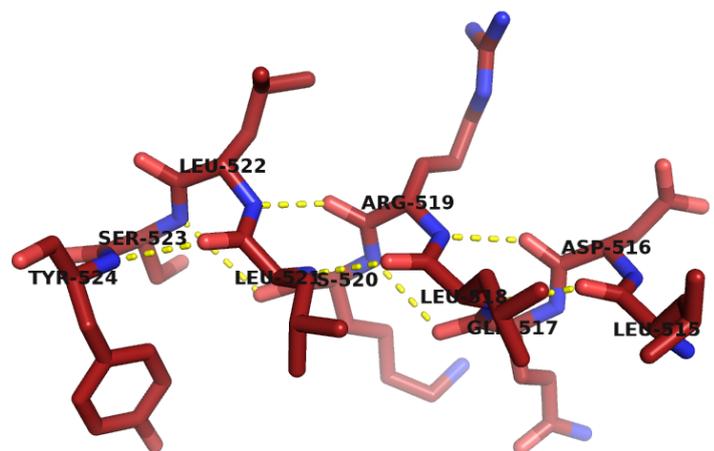
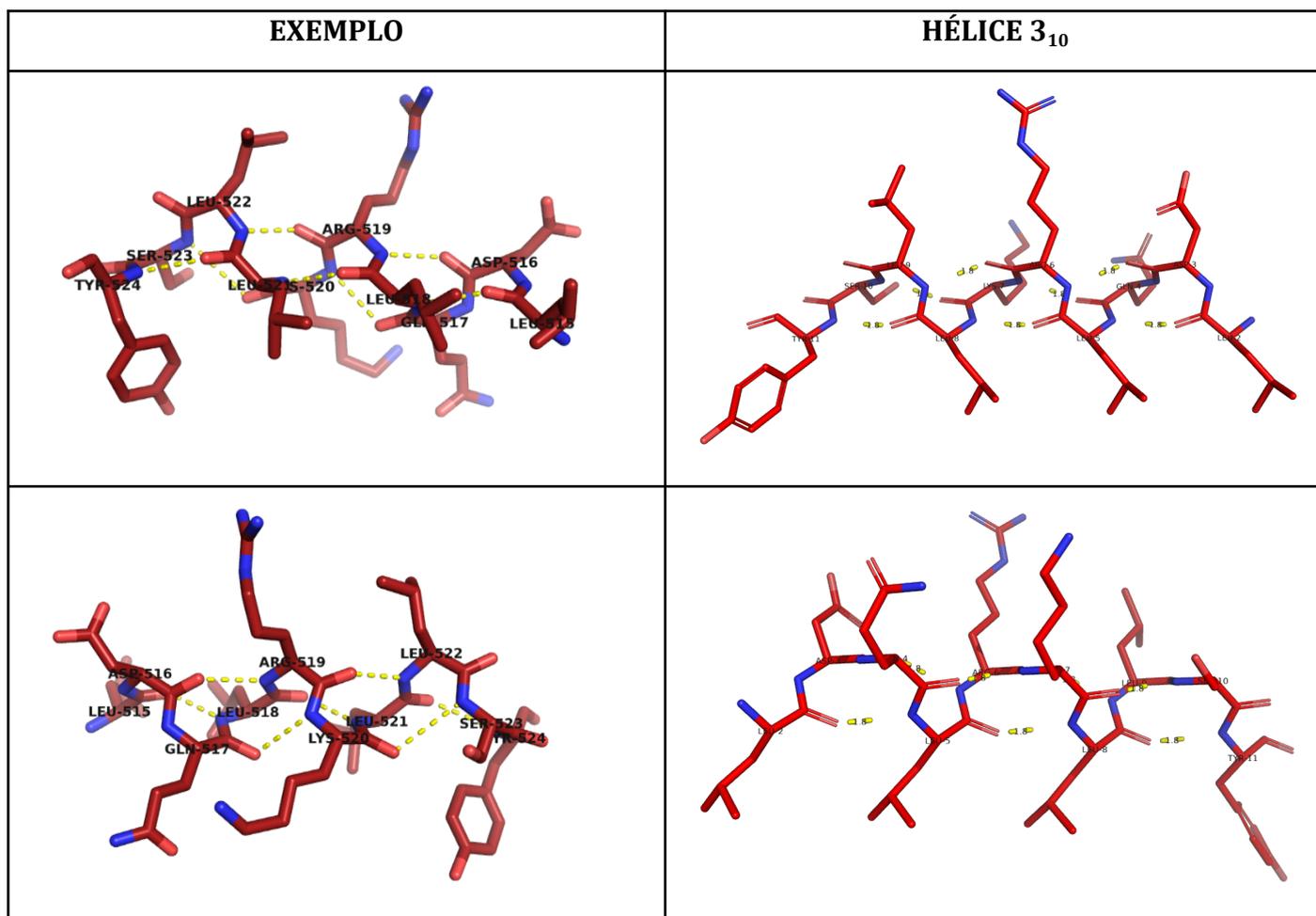
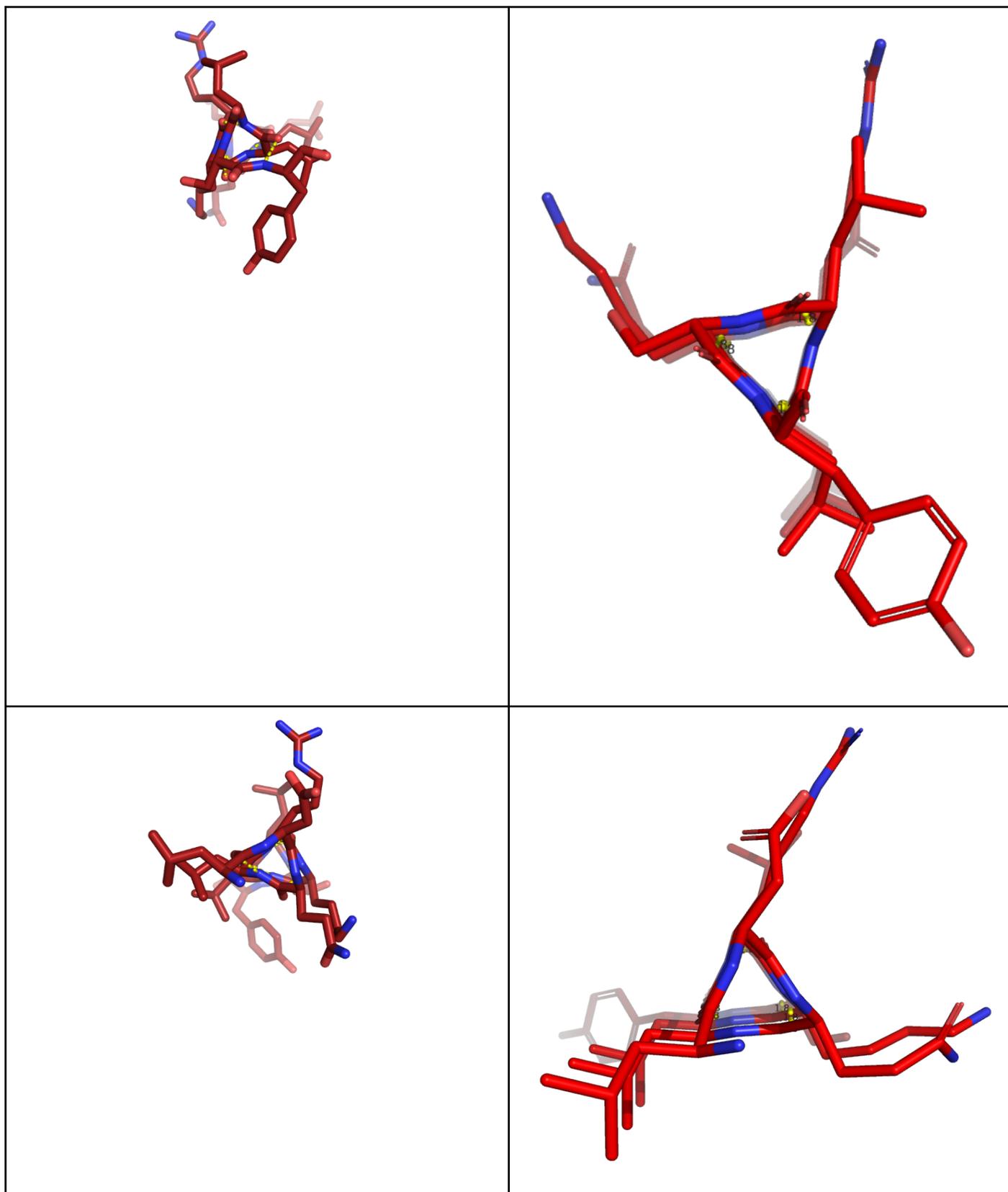


Figura 4. Exemplo de hélice 3_{10} .

Obs: No caso do ângulo Ψ (psi) no pymol o ângulo é 154 graus





π -hélice é uma estrutura secundária cuja conformação em espiral posiciona o grupo C=O do resíduo n da cadeia polipeptídica em geometria favorável para receber ligação de hidrogênio do grupo NH do resíduo localizado cinco posições a frente ($n + 5$) na cadeia polipeptídica (Figura 5).

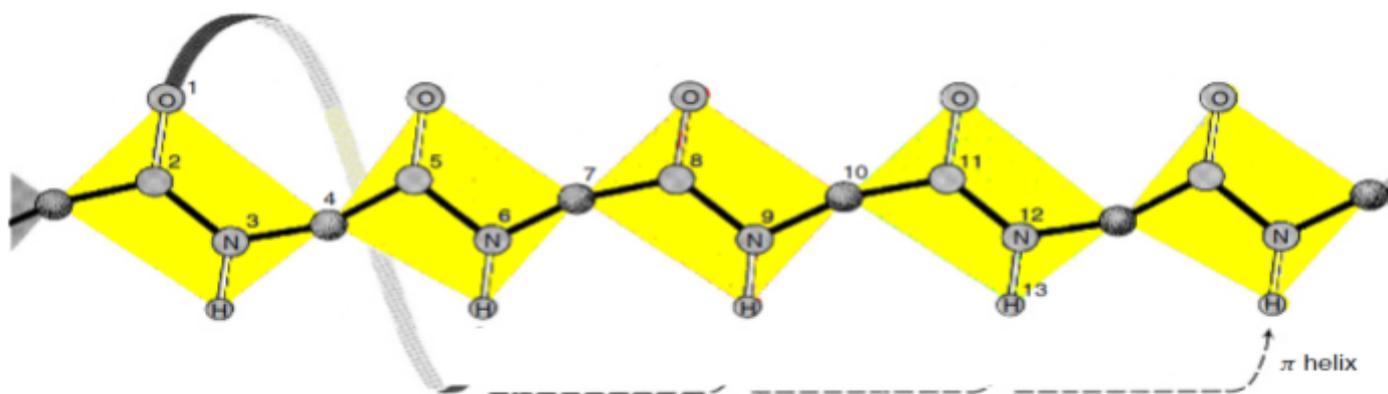


Figura 5. Padrão de ligação de hidrogênio em π -hélice.

Exercício 3

Utilizar os modelos atômicos de aminoácidos para montar uma π -hélice com 11 resíduos de acordo com a estrutura primária (Figura 6)

Estrutura Primária:

203-NLQLVGEACFT-213

Características π -hélice

Ligação de H = $n - n+5$

Período = 4,4 aa/volta

$\Phi = -57^\circ$

$\Psi = -70^\circ$

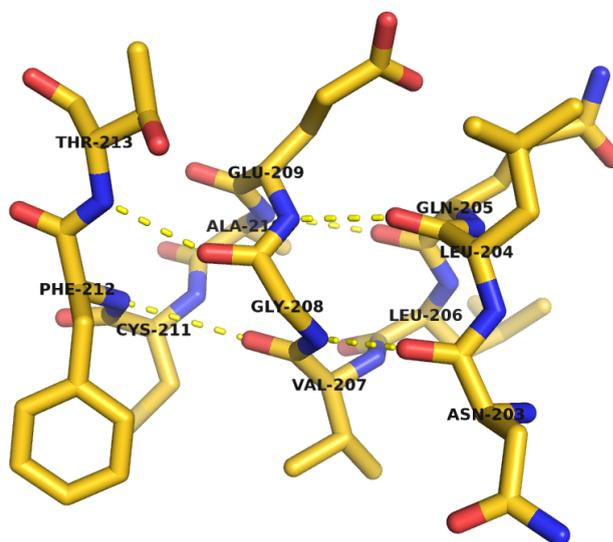
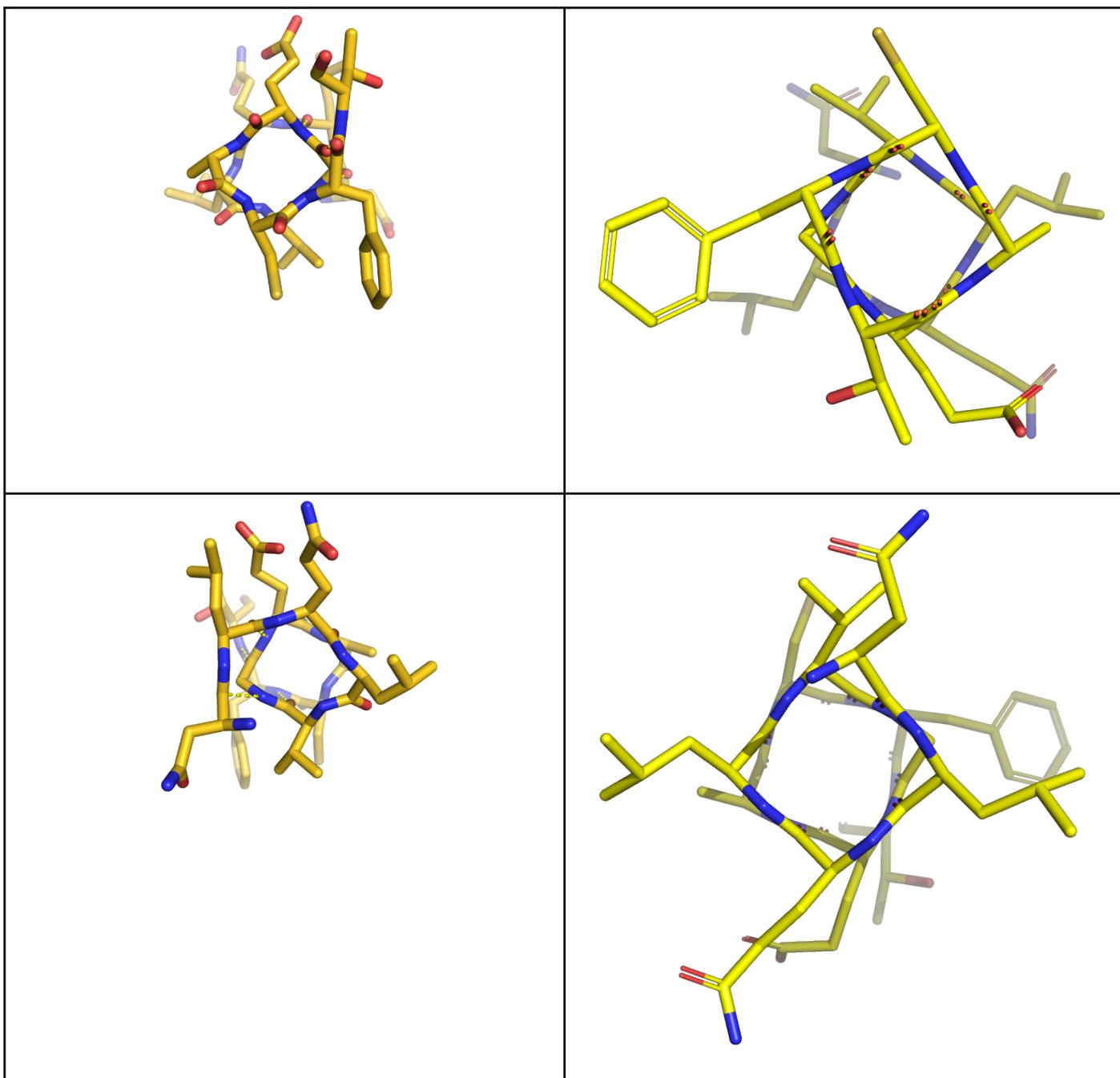


Figura 6. Exemplo de π -hélice.

Obs: No caso do ângulo Ψ (psi) no pymol o ângulo é 110 graus

EXEMPLO	π -HÉLICE



Exercício 4

Compare os três tipos de hélices conforme o exemplo

EXEMPLO	EXERCÍCIO
