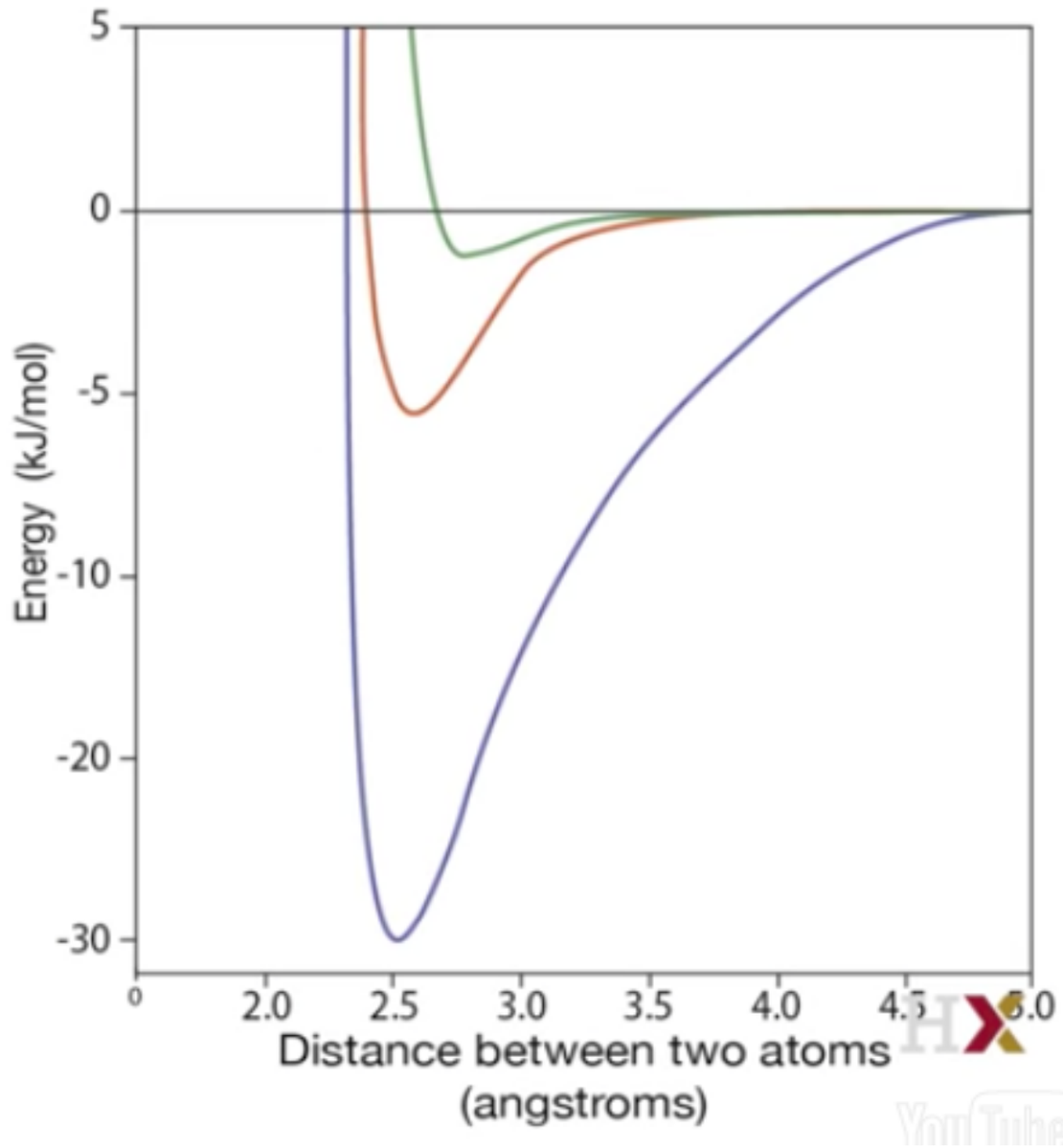
1. Qual é a definição de *protein fold*? E qual é a definição de domínio?

2. Por que existe apenas um número limitado de *folds* na natureza?

3. Qual das curvas abaixo corresponde a:

i) ligação de hidrogênio
ii) pontes salinas
iii) interações de van der Waals ?



1. Quais são as duas principais forças que promovem o enovelamento de uma proteína?

a) o efeito hidrofíbico
b) a diminuição de entropia das cadeias
c) o aumento de entropia das cadeias
d) a diminuição de entropia do solvente devido ao enovelamento
e) entalpia

2. Qual é a principal força que desfavorece o enovelamento de uma proteína ?

a) entalpia
b) o efeito hidrofíbico
c) a entropia das cadeias
d) o aumento de entropia da água

Qual é a principal força que contribui para a estabilização da estrutura secundária ?

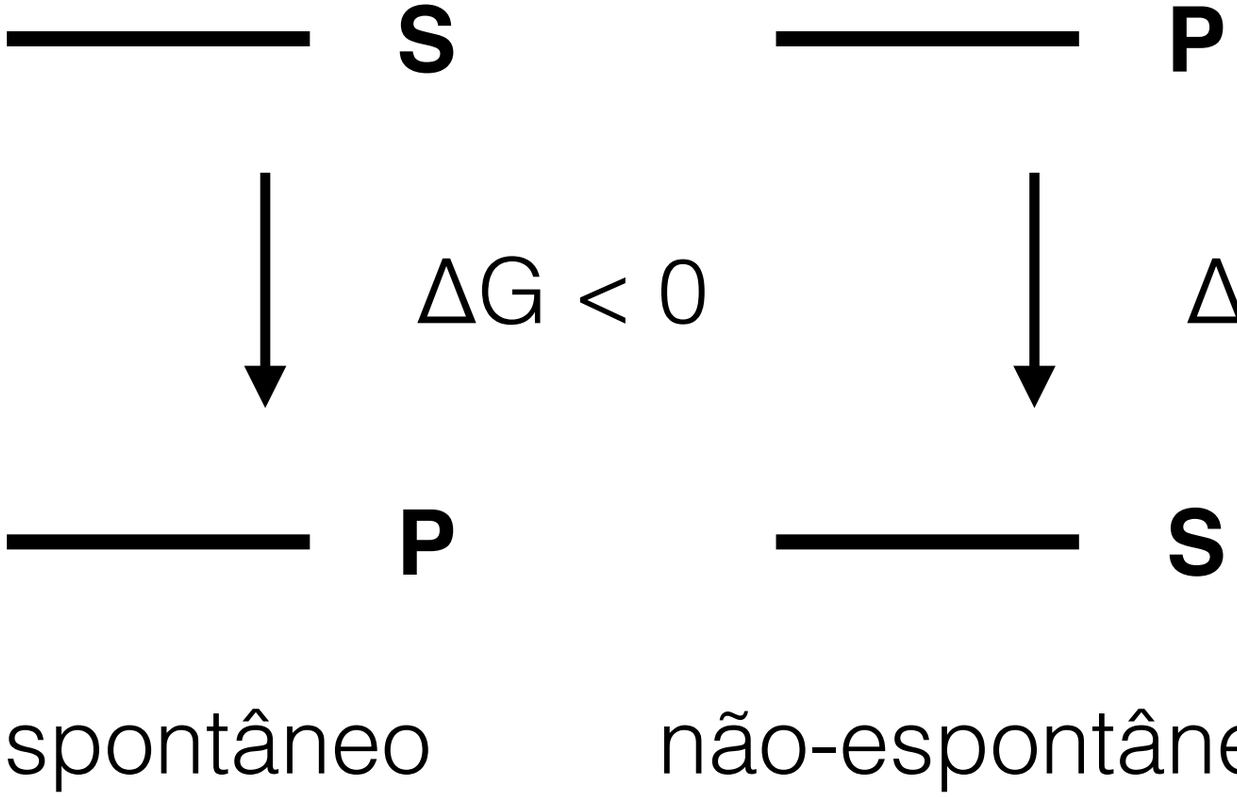
a) ligação de hidrogênio
b) o efeito hidrofóbico
c) interações de van der Waals
d) pontes salinas

Espontaneidade

$$G = H - TS$$

processo espontâneo: diminuição de energia livre

reação bioquímica espontânea: exergônica



$$\Delta G = \Delta H - T\Delta S$$

ΔH < 0 (exotérmico)

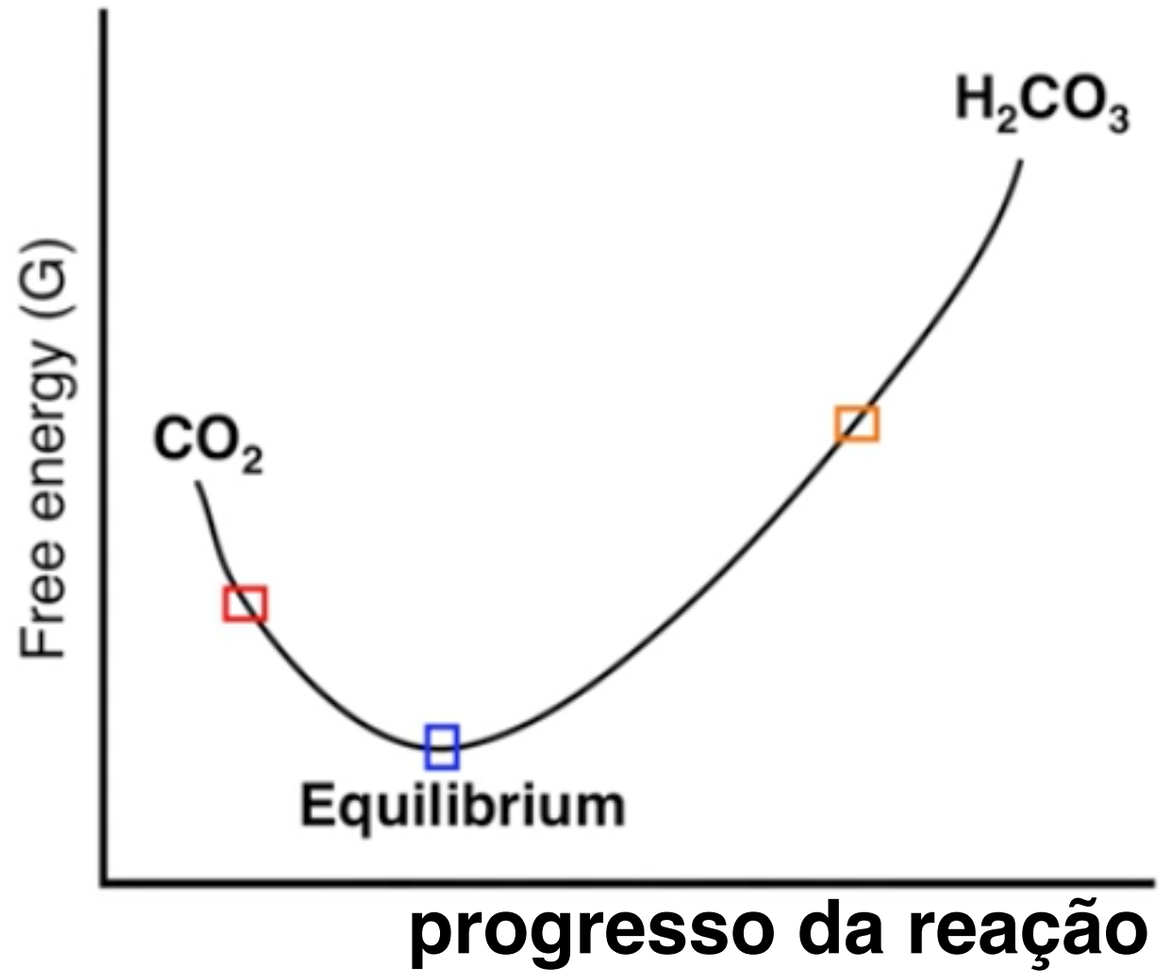
ΔH > 0 (endotérmico)

Direcionalidade

$$CO_2 + H_2O \rightleftharpoons H_2CO_3$$

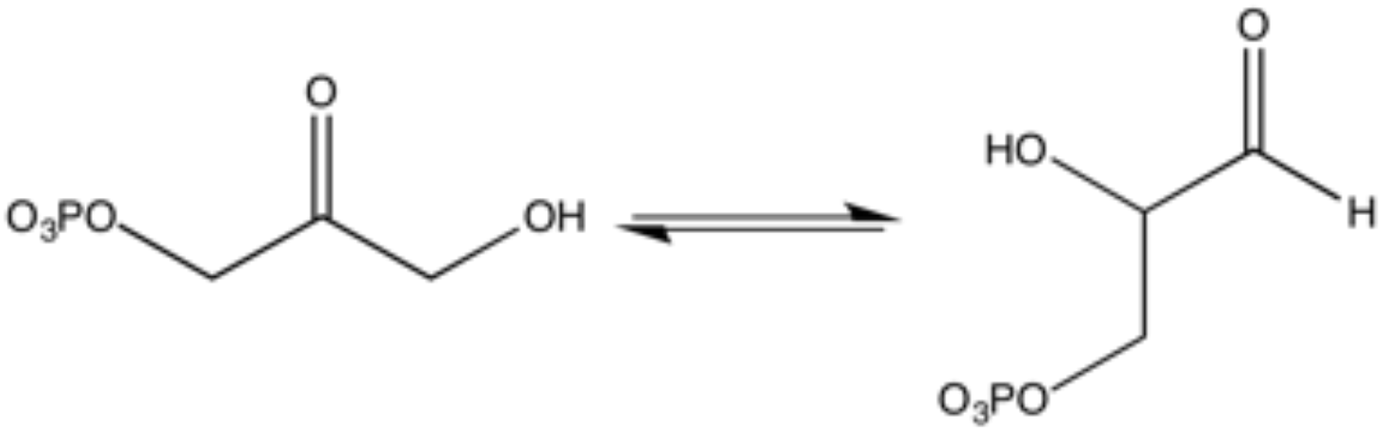
$$S \rightleftharpoons P$$

Princípio de Le Chatelier



Se conhecemos a constante de equilíbrio, e as concentrações de reagentes e produtos no início, podemos prever qual será o sentido da reação

Constante de equilíbrio



di-hidroxi-cetona-fosfato

gliceraldeido-3-fosfato

$$K_{eq} = 0.0475$$

T = 298 K e R = 8.315 $JK^{-1}mol^{-1}$

$$\Delta G^0 = -RT\ln K_{eq} \quad = +7.55\ kJ.mol^{-1}$$

Não espontânea

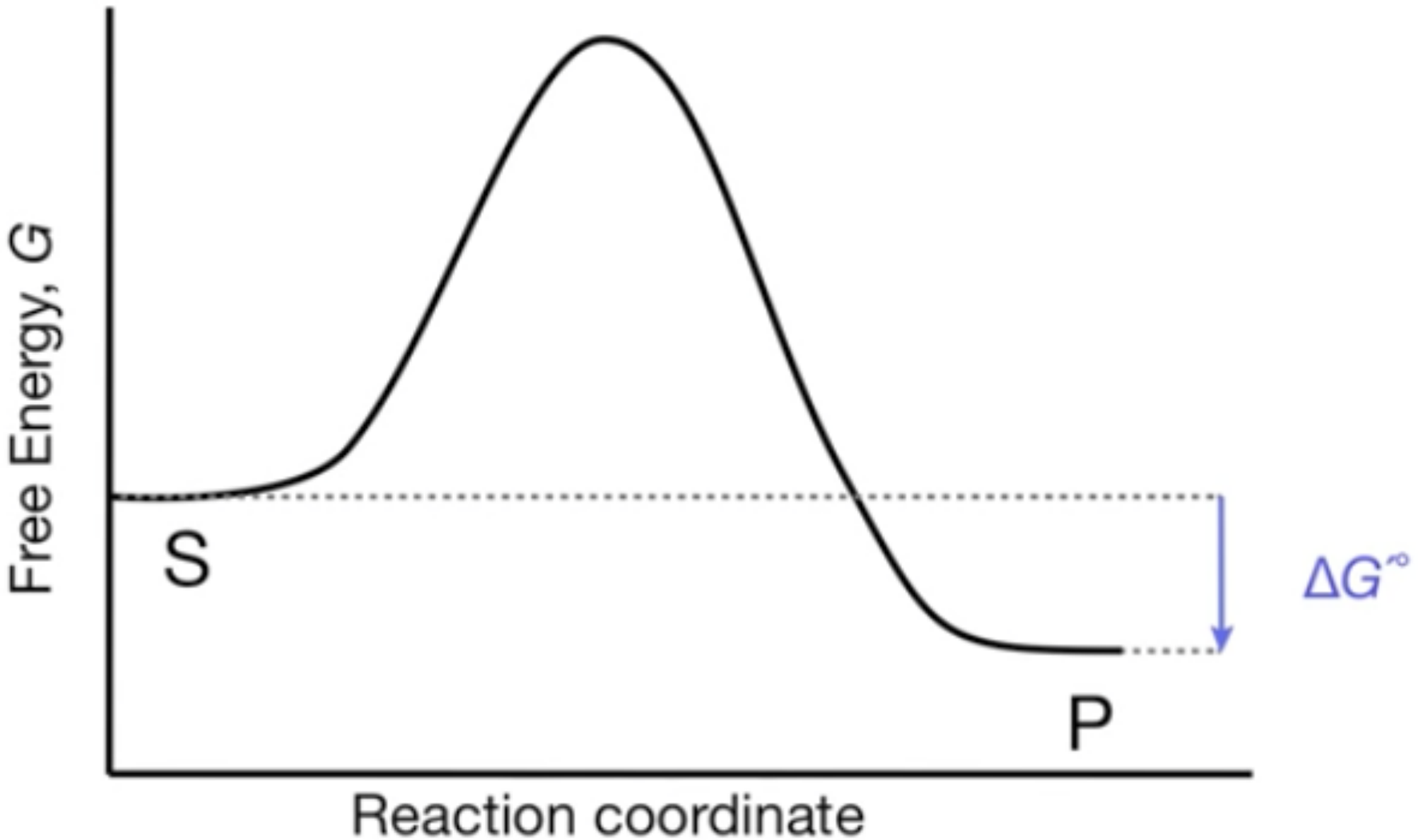
$$\Delta G = \Delta G° + RTln\frac{[produtos]}{[reagentes]}$$

ΔG nas condições celulares

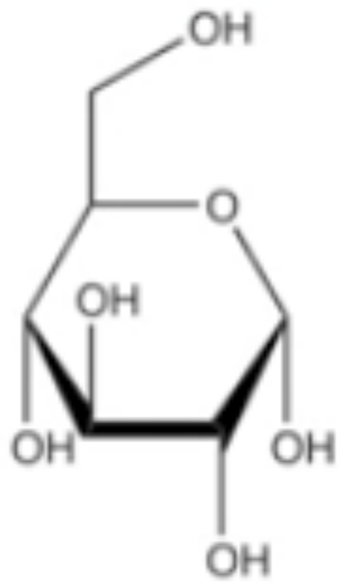
$$\Delta G = \Delta G° + RTln\frac{[3\times10^{-3}]}{[200\times10^{-3}]} = +\ 7.55 - 10.41\ kJ.mol^{-1}$$

espontâneo nestas condições

Velocidade



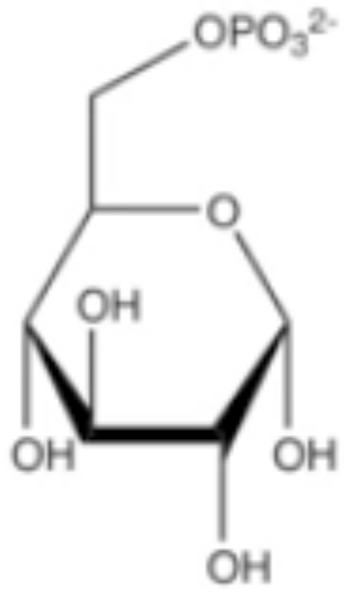
Glucose



+ATP

↓ Hexokinase

Glucose-6-phosphate



+ADP

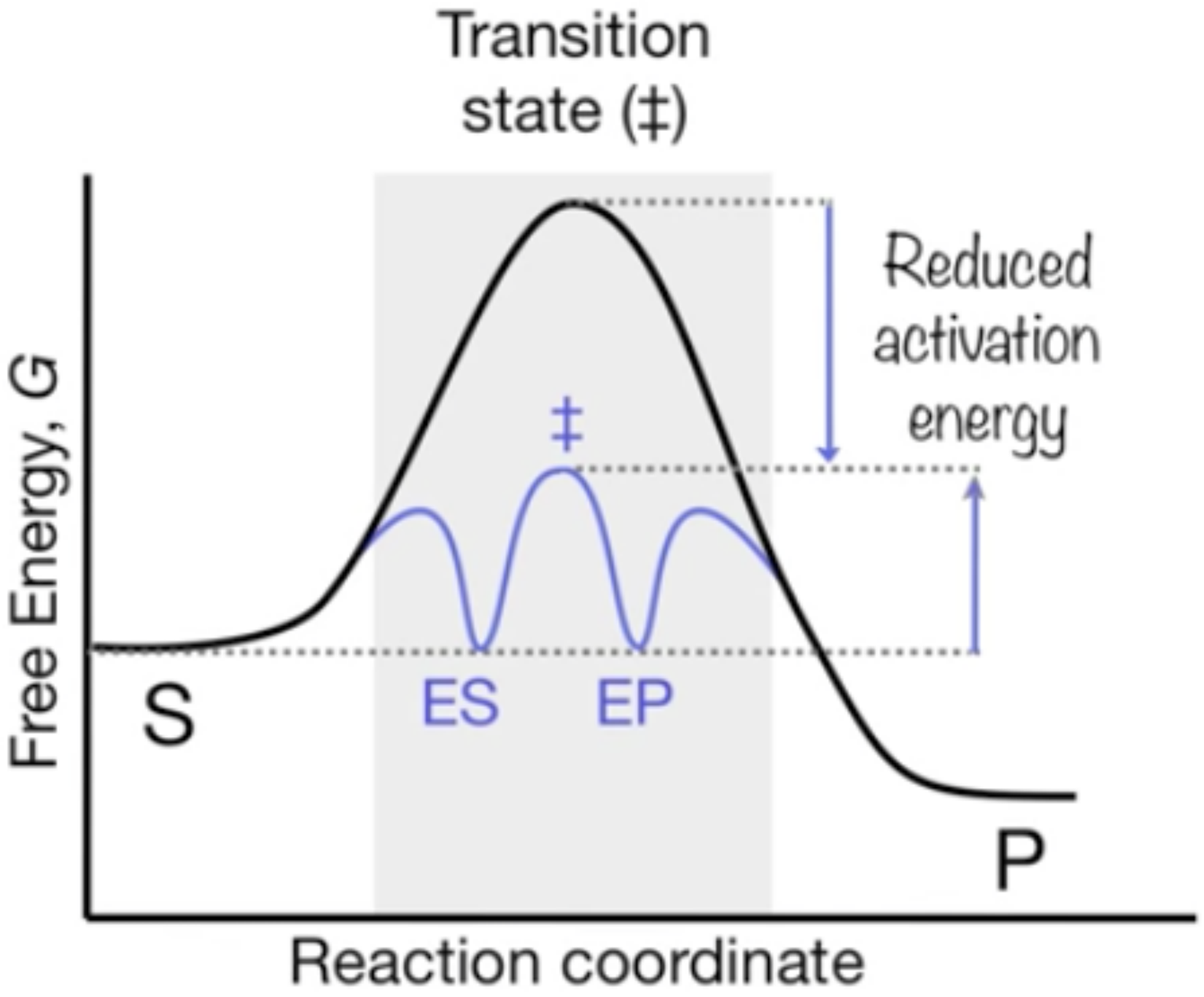
$v \sim 10^{-13}$ mol.L^{-1}.min^{-1}

$v \sim 1.3 \times 10^{-3}$ mol.L^{-1}.min^{-1}

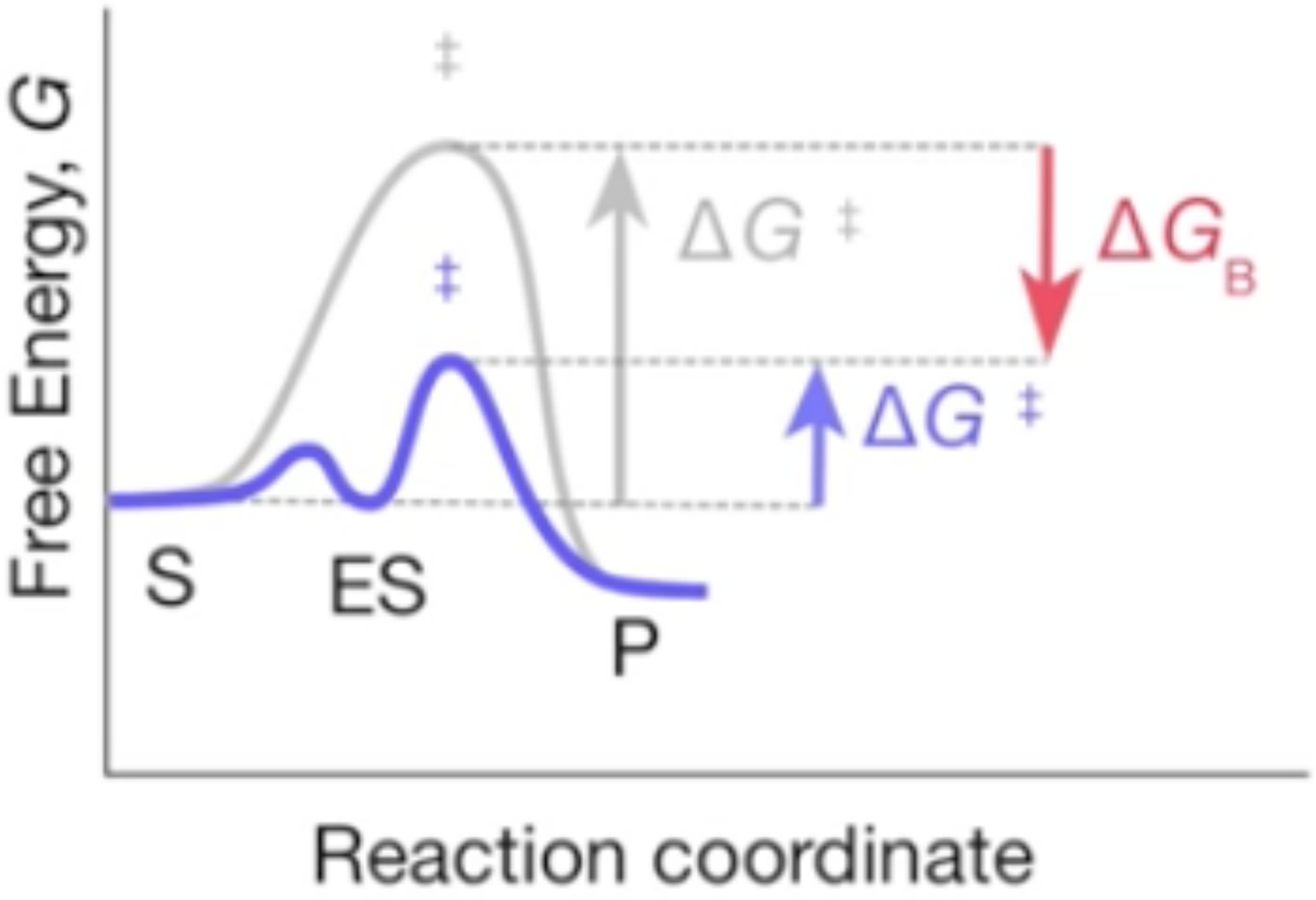
~ 10^{10} vezes + rápida

$\Delta G^0 = -16.7$ kJ.mol^{-1}

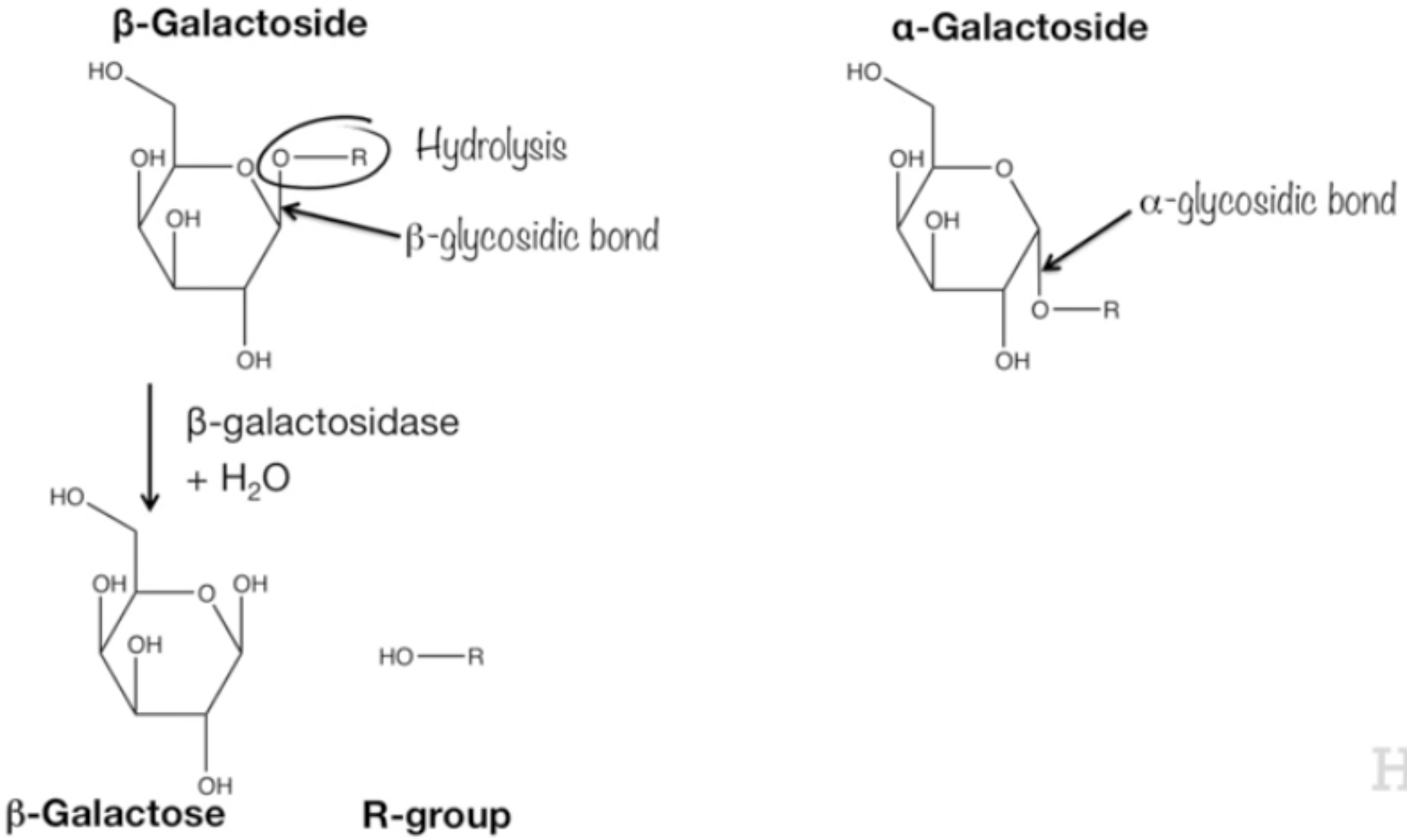
$$E + S \rightleftharpoons ES \rightleftharpoons EP \rightleftharpoons P + E$$



Por que enzimas são bons catalisadores?



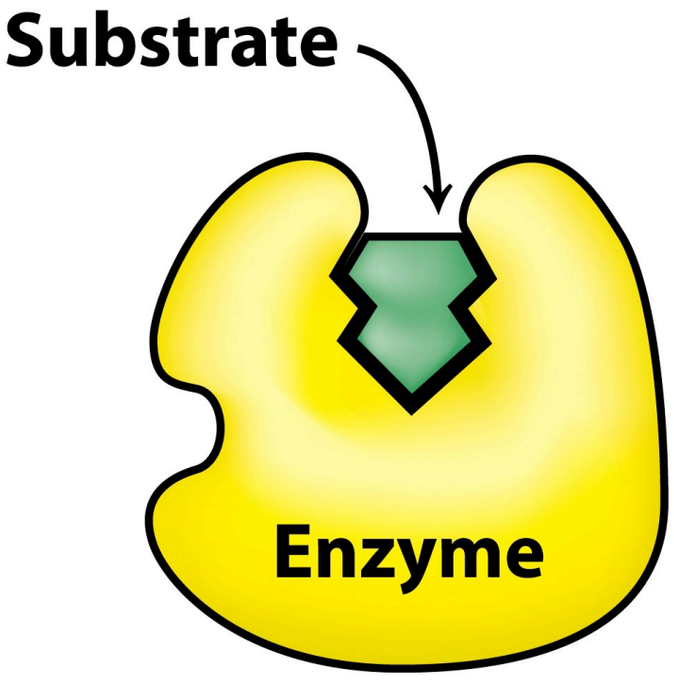
Por que enzimas são bons catalisadores?



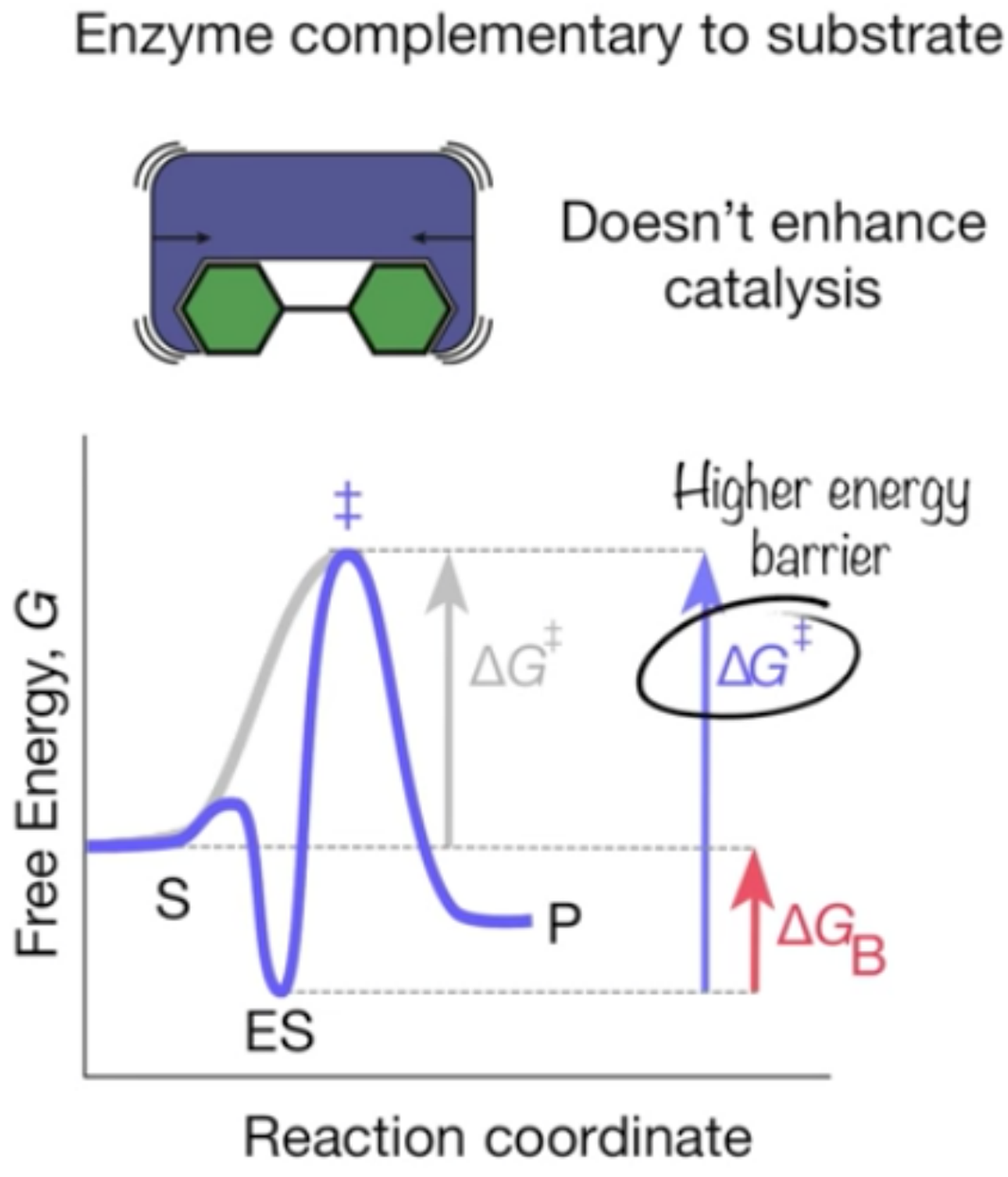
Enzimas são altamente específicas

Por que enzimas são bons catalisadores?

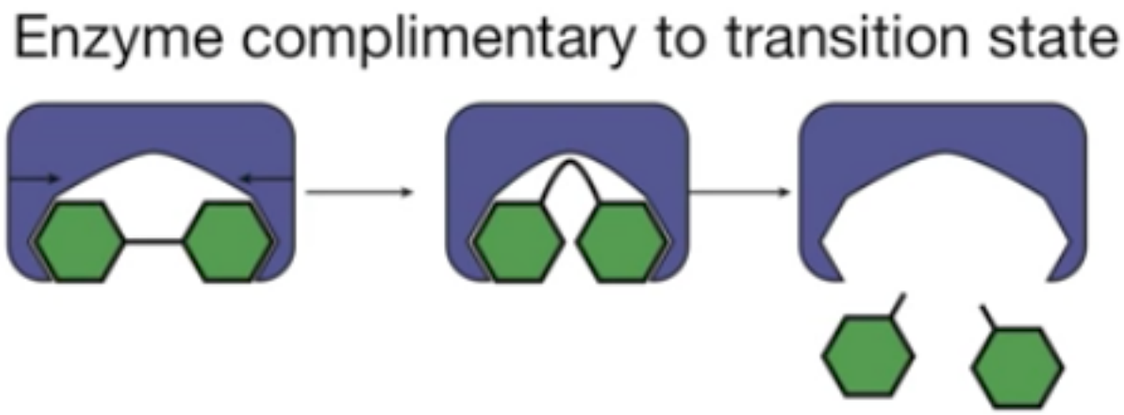
-Modelo de Emil Fischer, 1890

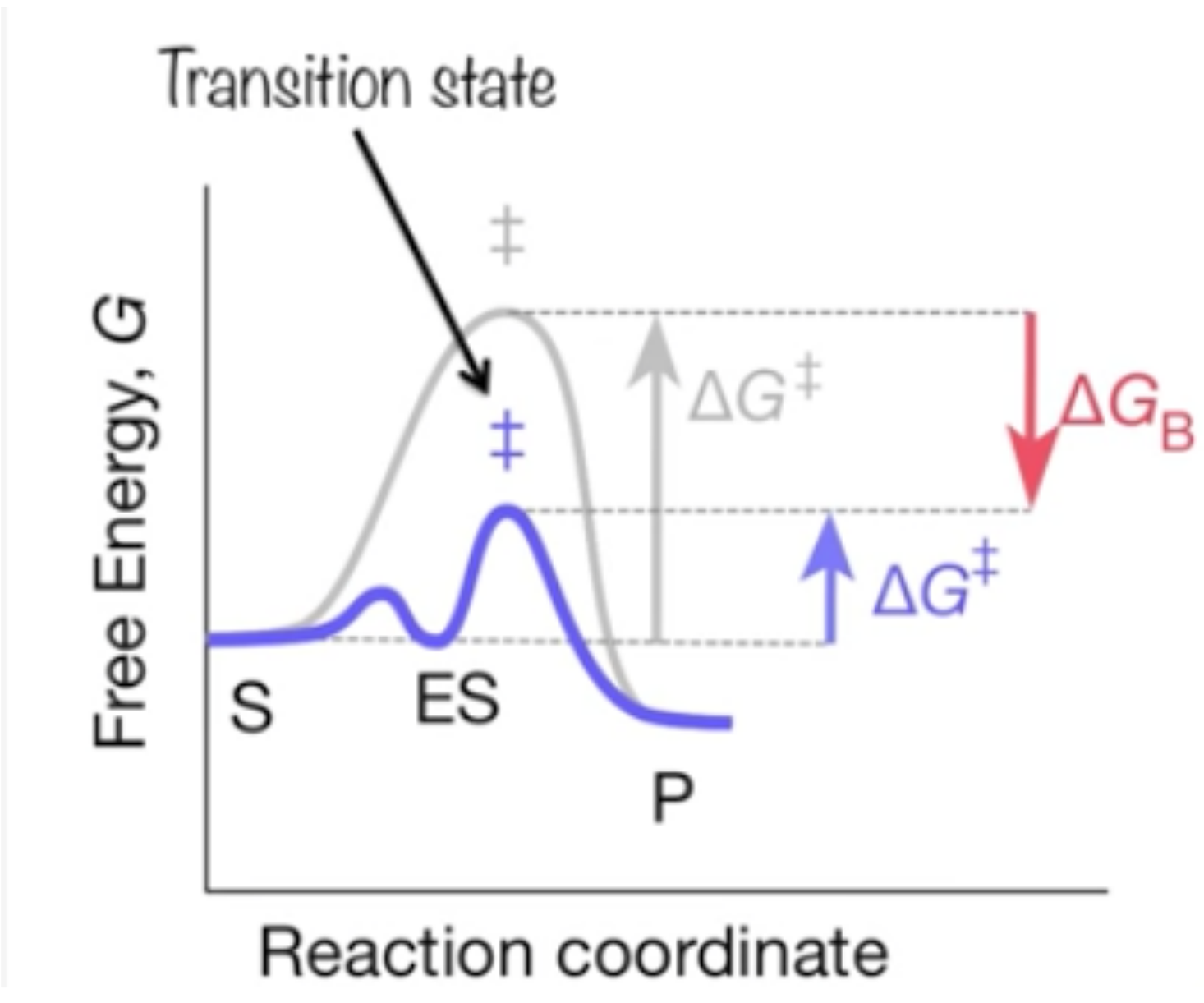


hipótese *Lock and Key*



Por que enzimas são bons catalisadores?



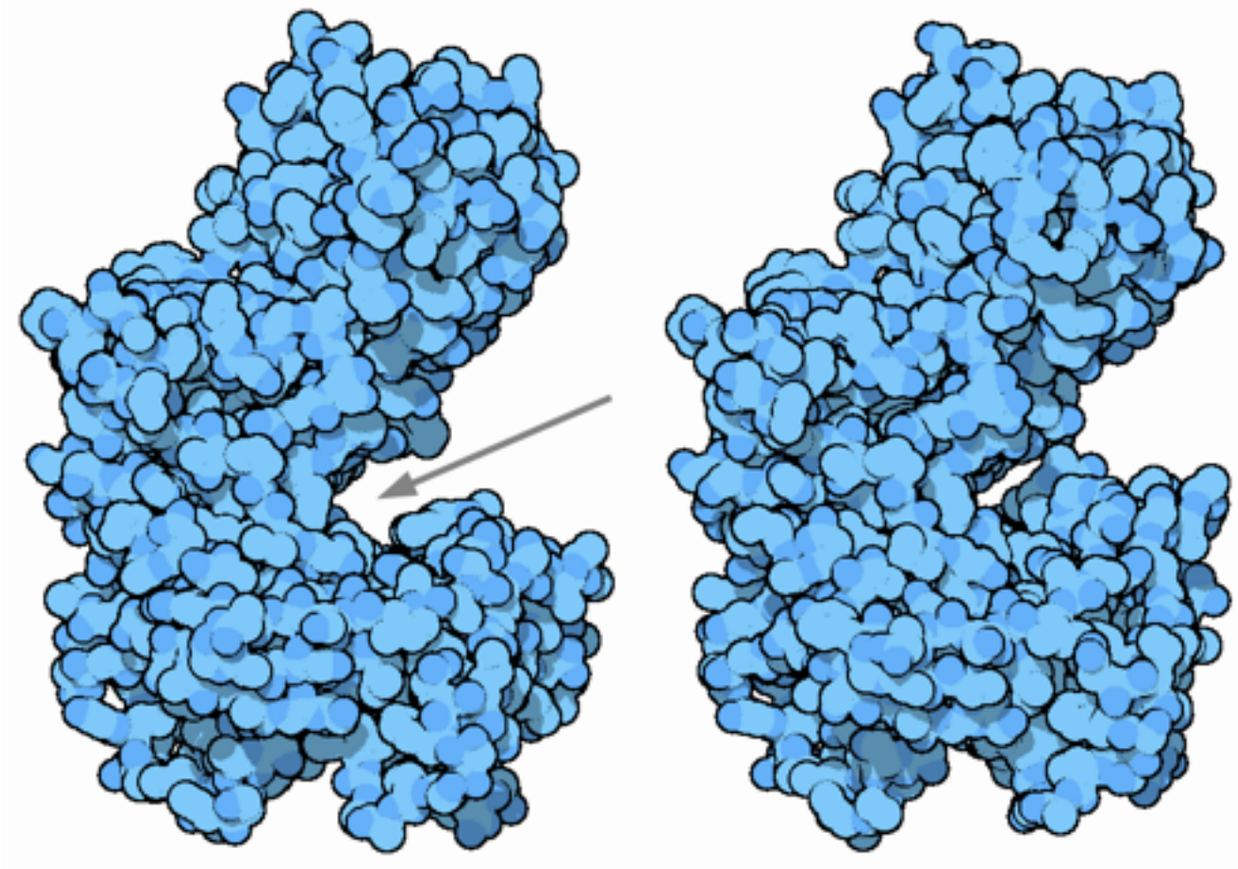


Por que enzimas são bons catalisadores?

-Hipótese de Daniel Koshland, 1958

-interações fracas entre enzima e estado de transição

-a conformação da enzima se altera após a ligação ao substrato de forma a favorecer a catálise



Chymotrypsinogen

1 15 245

Trypsin

Π-Chymotrypsin

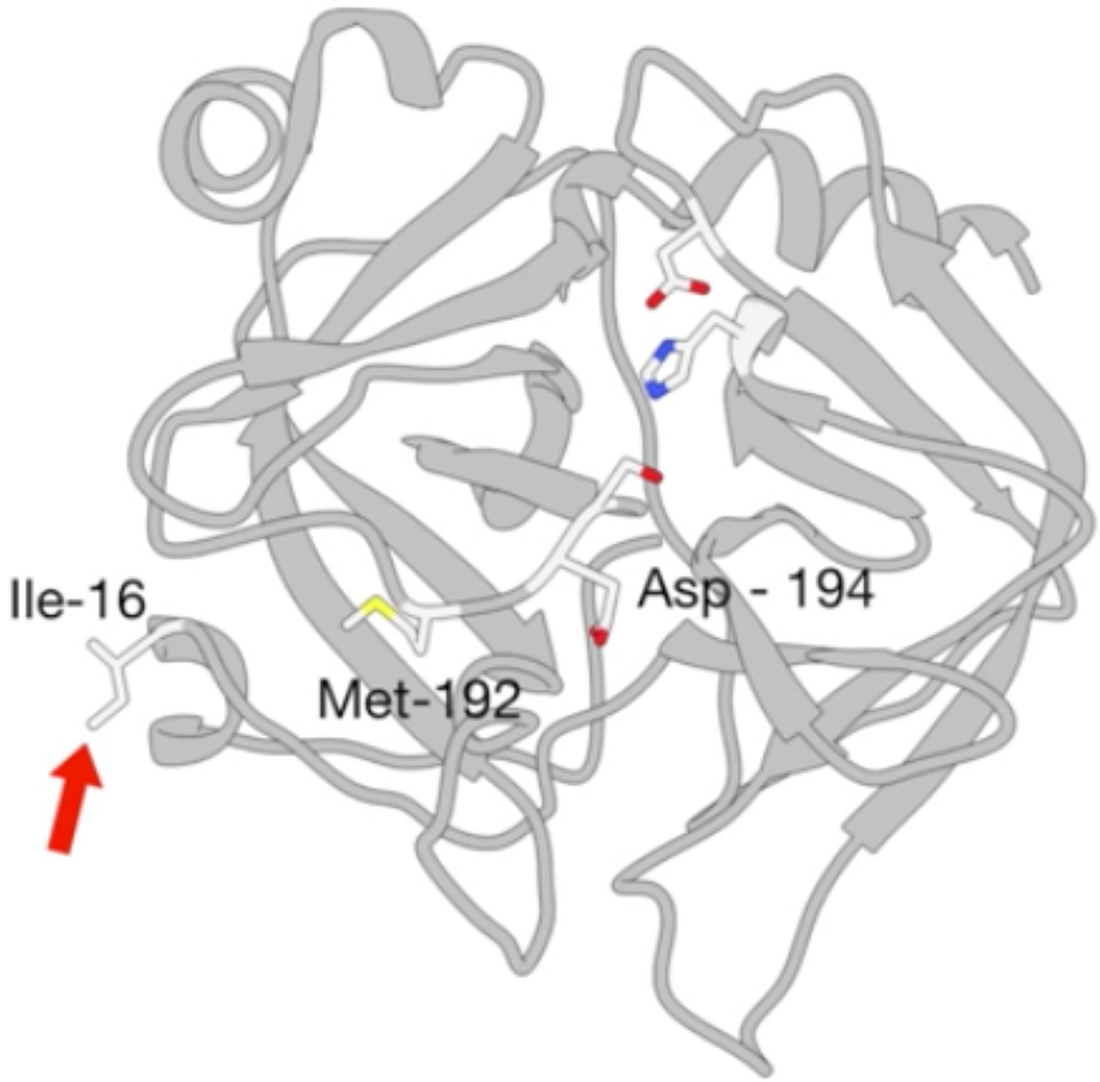
1 15 16 245

Autolysis

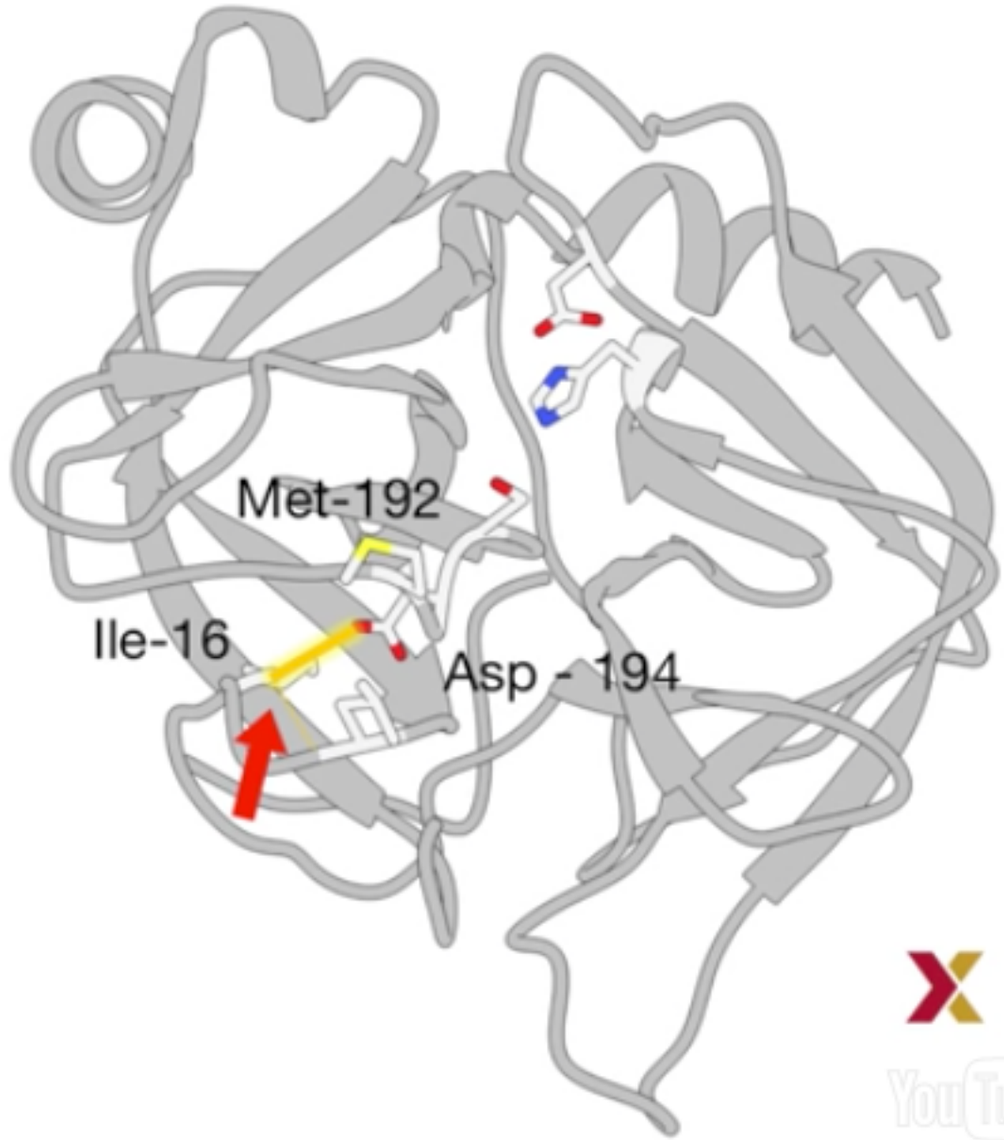
α-Chymotrypsin

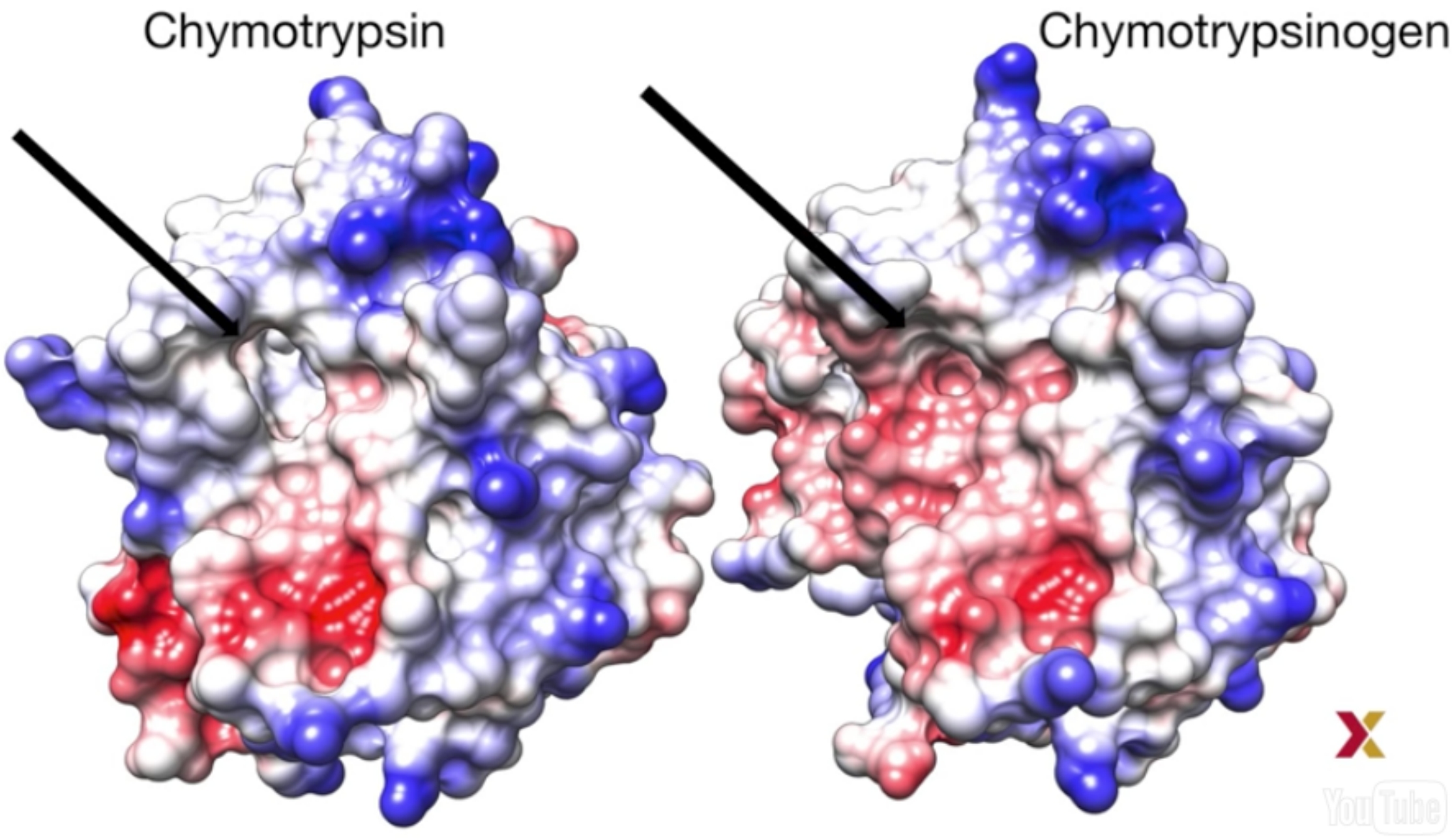
1 13 16 146 149 245

Chymotrypsinogen



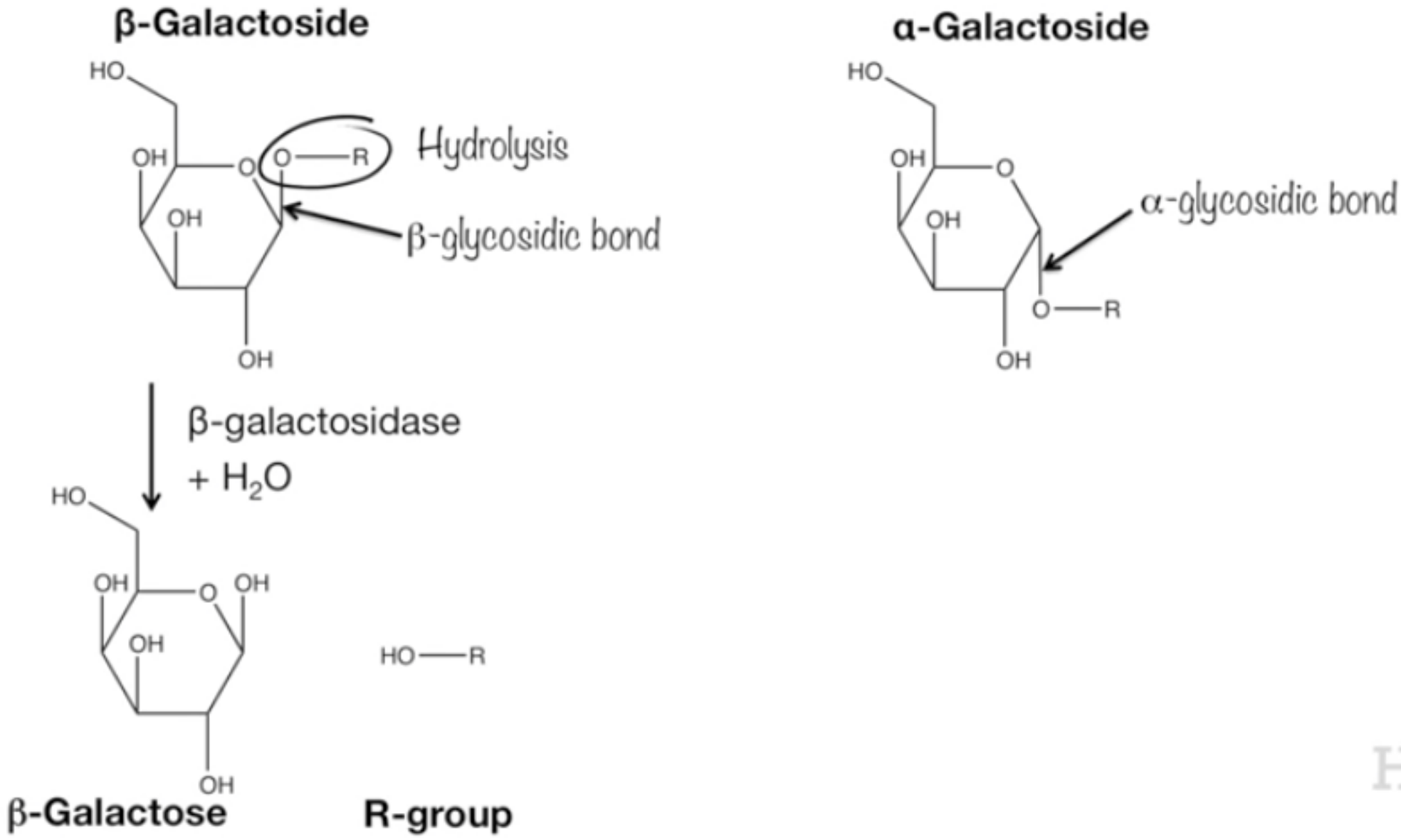
Chymotrypsin



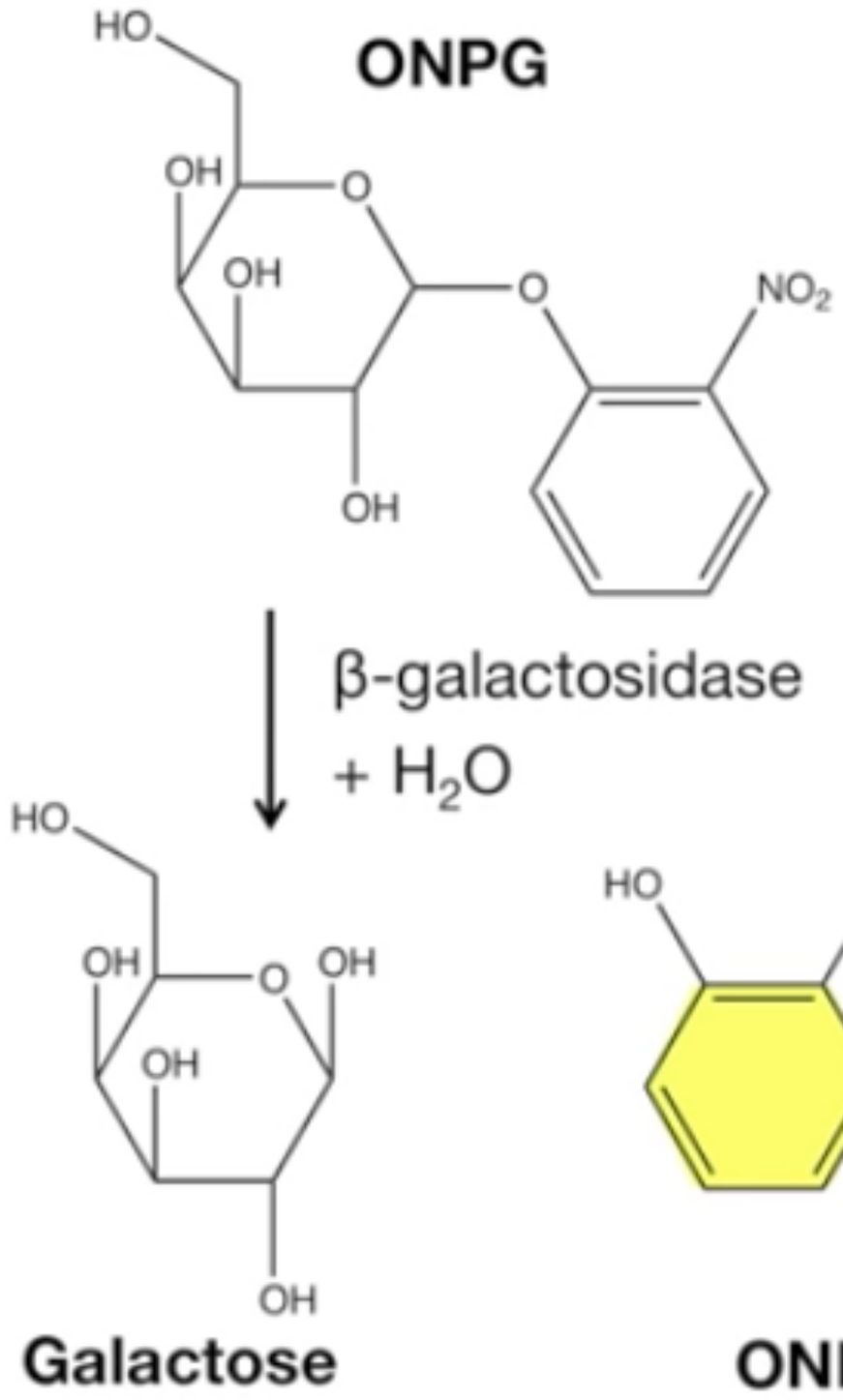


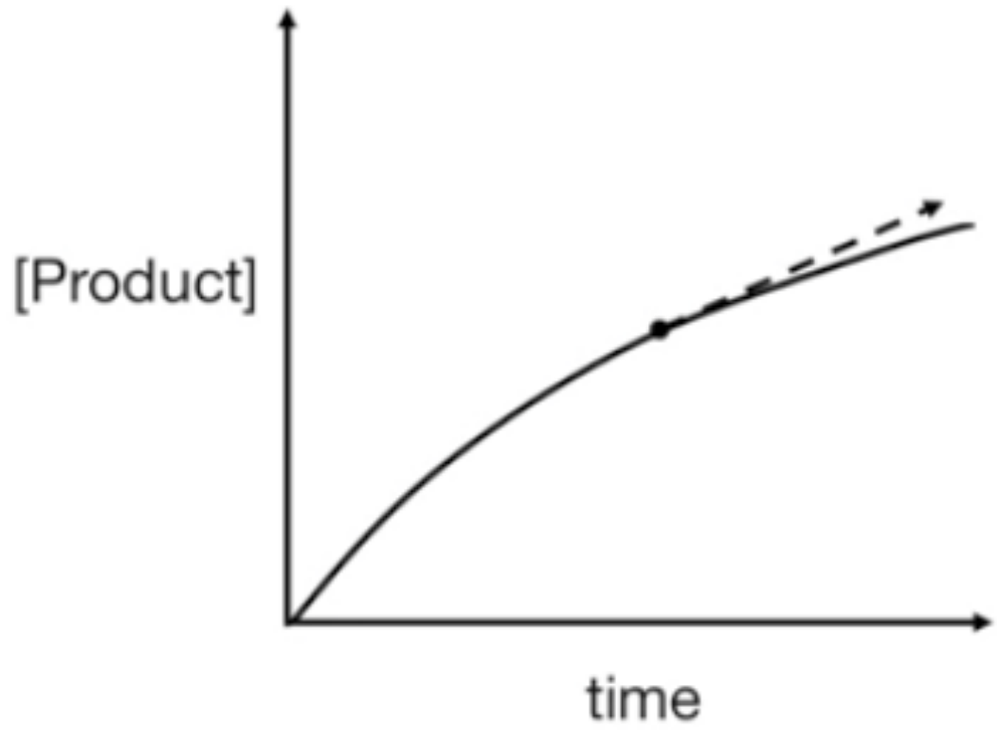
Active enzyme ***Inactive enzyme***

Como podemos medir a velocidade de reação?

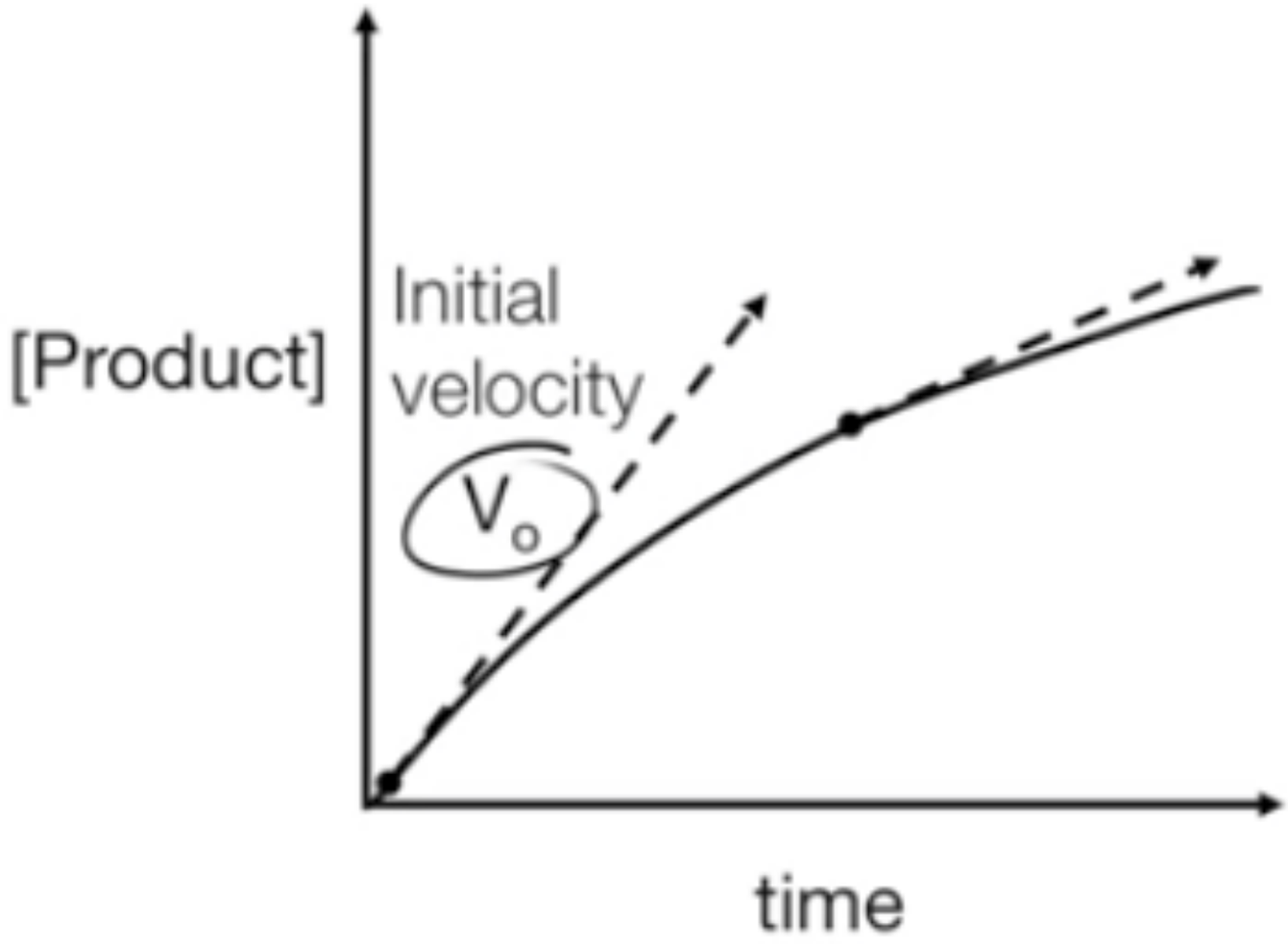


Podemos usar p-nitrofenol para medir a velocidade da betaglicosidase

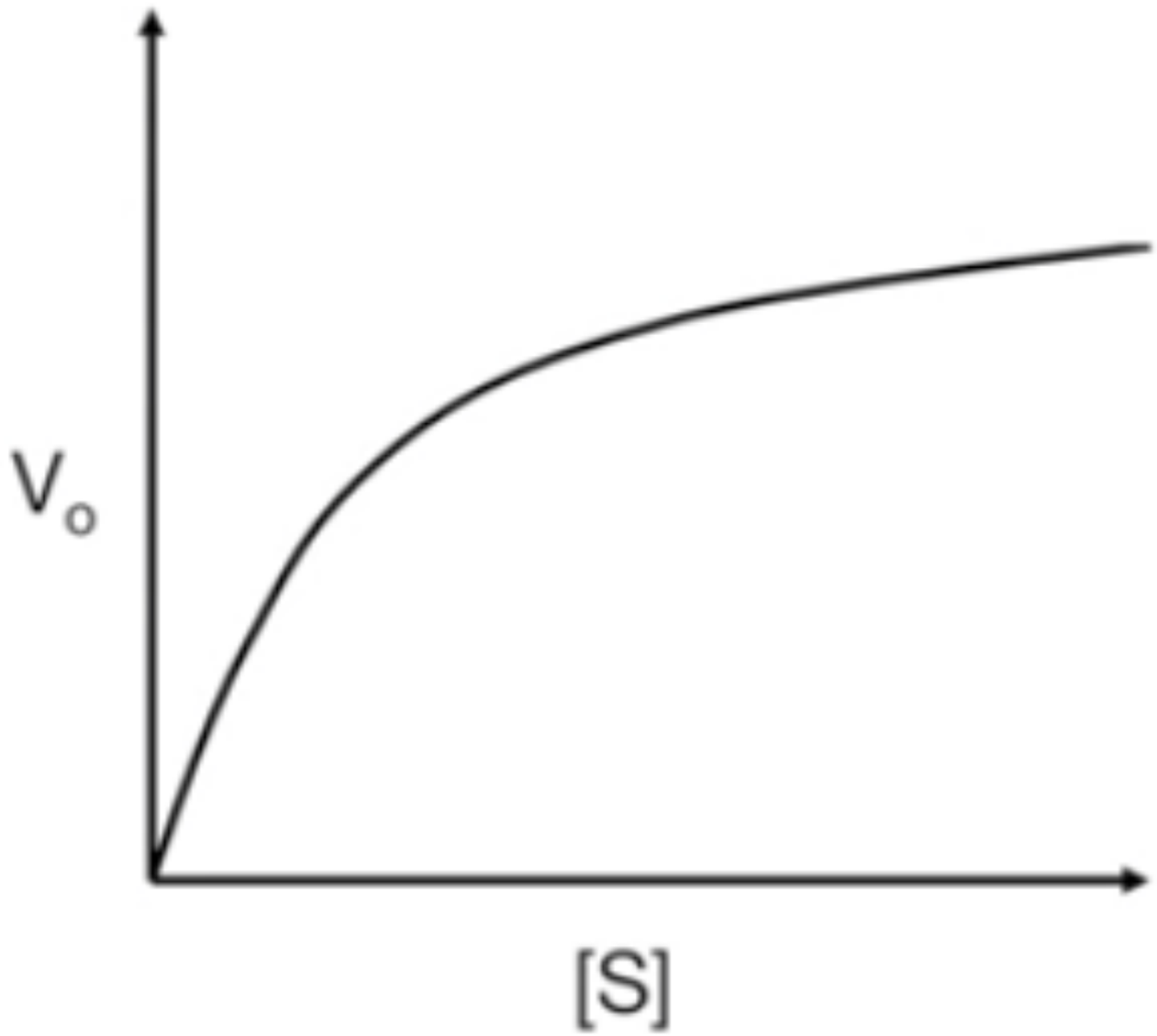




$$V = \frac{d[P]}{dt}$$

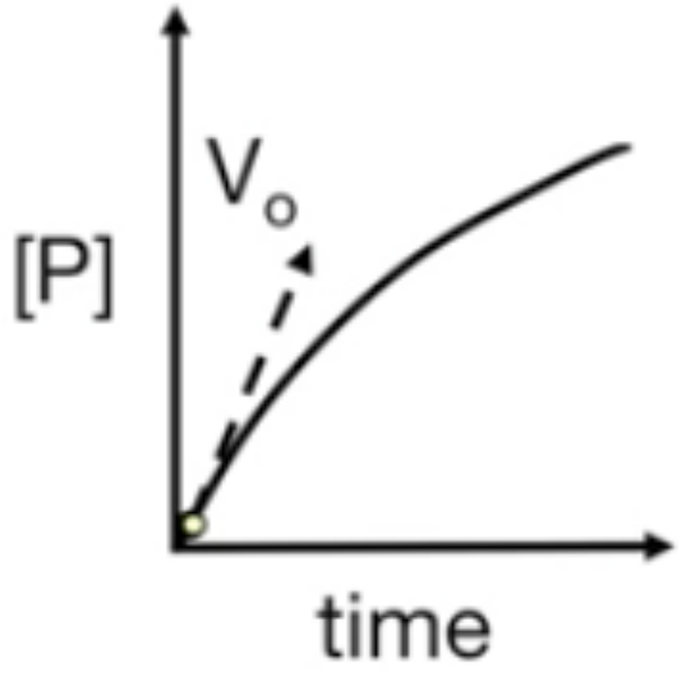


$$V = \frac{d[P]}{dt}$$



Holding [E] constant

$$E + S \underset{k_{-1}}{\overset{k_1}{\rightleftharpoons}} ES \xrightarrow{k_2} P + E$$



$$V_o = k_2 [ES]$$

$$V_{max} = k_2 [E_T]$$

Max rate:
all enzyme is in
ES complex