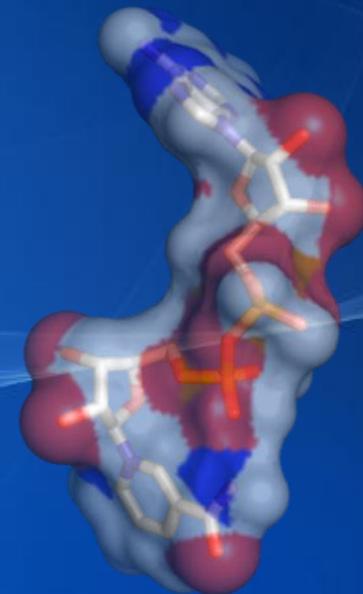
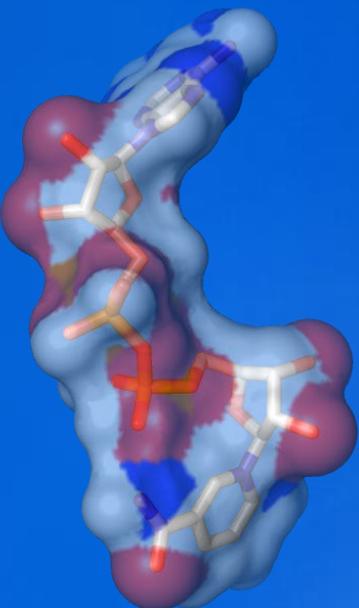


7600080 – Biologia Molecular Estrutural

Prof. Rafael V. C. Guido
Prof. André L.B. Ambrósio



Bacharelado em Ciências Físicas e Biomoleculares
Instituto de Física de São Carlos - USP



Objetivos

- Estudar os princípios básicos de estrutura proteica, em particular do enovelamento de proteínas;
- Adquirir conhecimentos básicos sobre a relação entre estrutura e função;
- Exemplificar com os mecanismos de ação de proteínas do sistema imune, enzimas, vírus, proteínas de membrana etc.;
- Adquirir conhecimentos básicos sobre as metodologias utilizadas para a elucidação experimental da estrutura tridimensional de biomacromoléculas, ou seja, Cristalografia de Proteínas, Ressonância Magnética Nuclear e Crio-microscopia Eletrônica.



<http://www.ufrgs.br/bioinfo/ebook/>

Bioinformática: da Biologia à Flexibilidade Molecular
por Hugo Verli e Colaboradores

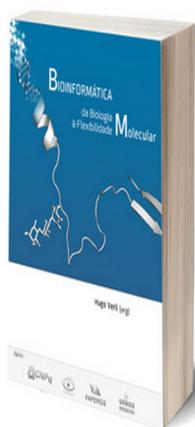
Grupo de Bioinformática Estrutural
Centro de Biotecnologia / UFRGS

Visite o site do Grupo >

Apresentação Galeria de Figuras

Bioinformática: da Biologia à Flexibilidade Moleculares

Bioinformática: da Biologia a Flexibilidade Molecular emprega uma definição abrangente para bioinformática, envolvendo qualquer técnica computacional aplicada ao estudo de sistemas biológicos. Busca, por conseguinte, oferecer uma percepção multidisciplinar da área, abordando tanto aspectos relacionados à sequências de nucleotídeos e aminoácidos quanto à estrutura e dinâmica de proteínas e outras moléculas. Adicionalmente, considerando que técnicas experimentais baseadas no uso de computadores devem, idealmente, ter seus resultados comparados a técnicas experimentais não-computacionais, este livro também inclui capítulos com alguns dos métodos mais frequentemente empregados na validação dos números que os programas nos oferecem.



Download do E-book
2631 downloads

Comentários



Há, contudo, diversas inserções ao longo do texto, em vermelho e fonte diferente, que buscam oferecer detalhes mais avançados, potencialmente úteis a alunos de pós-graduação.

Hugo Verli

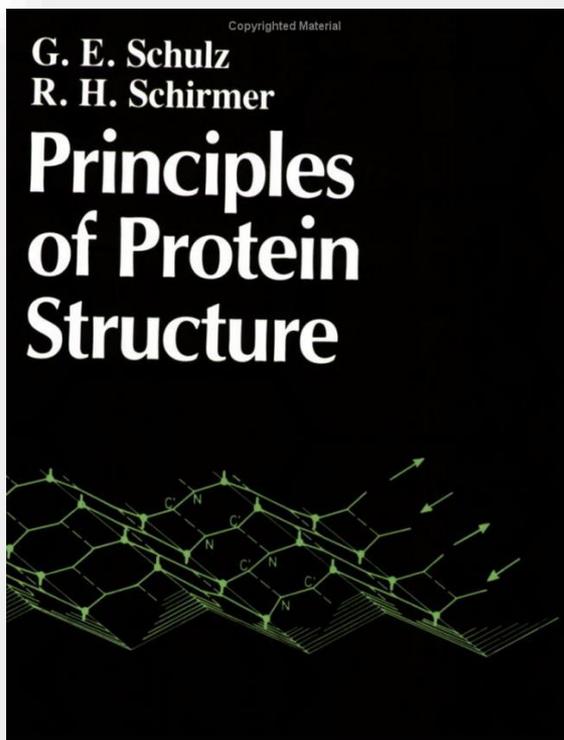
Professor de Bioinformática, CBiot - UFRGS

Editor

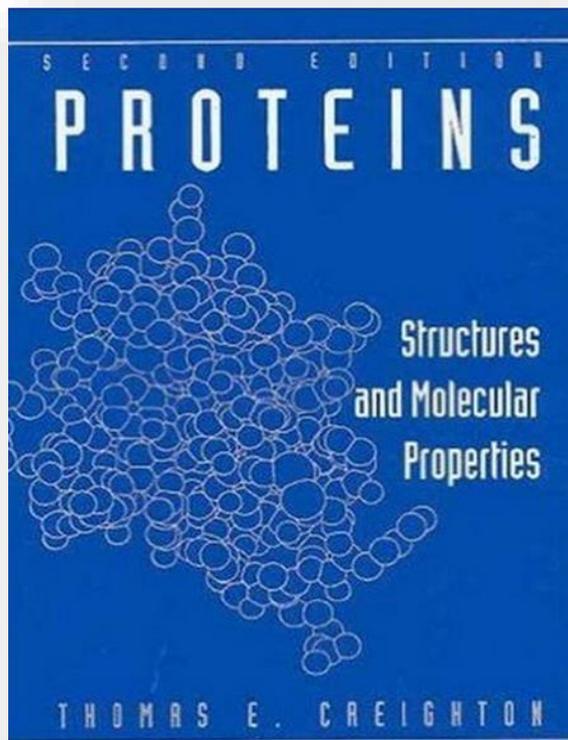
Hugo Verli

Formado em Farmácia pela Faculdade de Farmácia da UFRJ (2001), com mestrado em Química Orgânica pelo Instituto de Química da mesma universidade (2002) e doutorado em Biologia Celular e Molecular pelo Centro de Biotecnologia da UFRGS (2005). Desde 2006 é professor junto a esta universidade, lecionando disciplinas de química farmacêutica, modelagem molecular e bioinformática. Suas atividades de pesquisa estão voltadas principalmente para a estrutura, dinâmica e função de

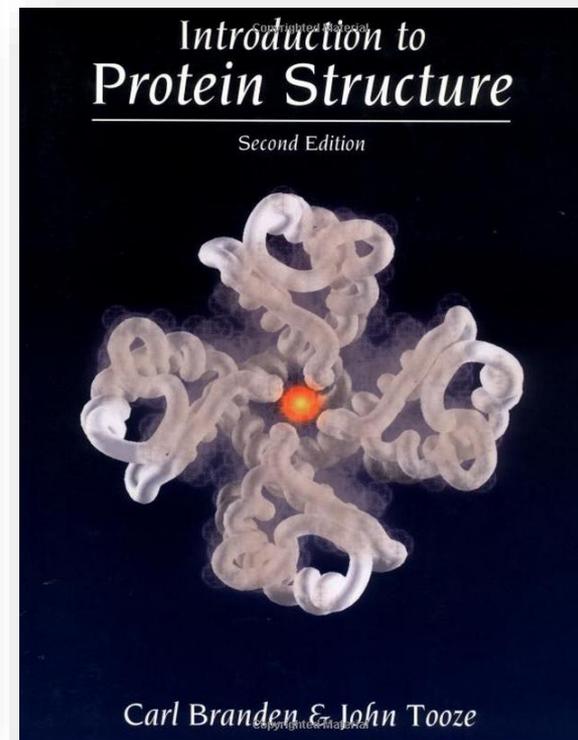
Capítulo 1: O que é bioinformática?	1
Capítulo 2: Níveis de informação biológica	13
Capítulo 3: Alinhamentos	38
Capítulo 4: Projetos genoma	62
Capítulo 5: Filogenia	80
Capítulo 6: Biologia de sistemas	115
Capítulo 7: Modelos tridimensionais	147
Capítulo 8: Dinâmica molecular	172
Capítulo 9: Atracamento	188
Capítulo 10: Dicroísmo circular	209
Capítulo 11: Infravermelho	220
Capítulo 12: RMN	236
Capítulo 13: Cristalografia	251



Schulz, G.E., Schirmer, R.H.
Principles of Protein Structure. Springer
Advanced Texts in Chemistry
- 1979.



Creighton, T. E.
Proteins: Structures and Molecular Properties,
Second Edition Edition. W. H.
Freeman - 1992.



Branden, C., Tooze, J.,
Introduction to Protein Structure. Garland Science;
2 edition - 1999.



- Introdução a macromoléculas biológicas;
- Propriedades conformacionais de uma cadeia polipeptídica e suas cadeias laterais;
- Hierarquia da Estrutura de Proteínas - Estrutura Primária, Secundária, Terciária, Quaternária; Voltas e Loops; Motivos, Padrões;
- Estruturas Super-secundárias e Domínios;
- Enovelamentos;
- Quiralidade em Estrutura Protéica;
- Diagrama de Ramachandran;
- Simetria em Estruturas Oligoméricas;
- Introdução à Cristalografia de Proteínas;
- Introdução à Ressonância Magnética Nuclear em Proteínas.
- Técnicas de estudo estrutural em macromoléculas: Espalhamento de raio-X a baixos ângulos, microscopia eletrônica.



7600080 – Biologia Molecular Estrutural

Avaliação

Relatórios (R): aulas práticas

Seminário (S): 24/11, 29/11 e 01/12

NOTA FINAL

$$NF = 0,2 R + 0,8 S$$

Será aprovado o aluno que obtiver nota final igual ou superior a 5,0 e tenha, no mínimo, 70% de frequência na disciplina



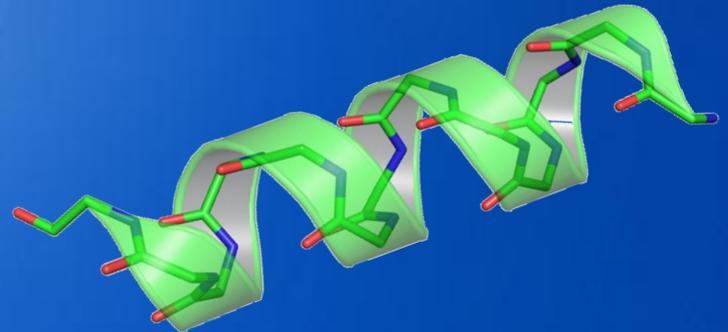
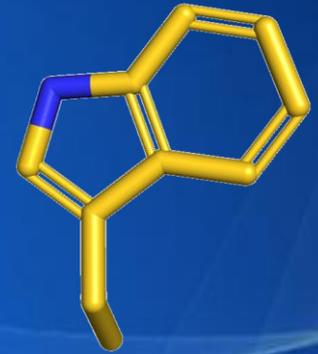
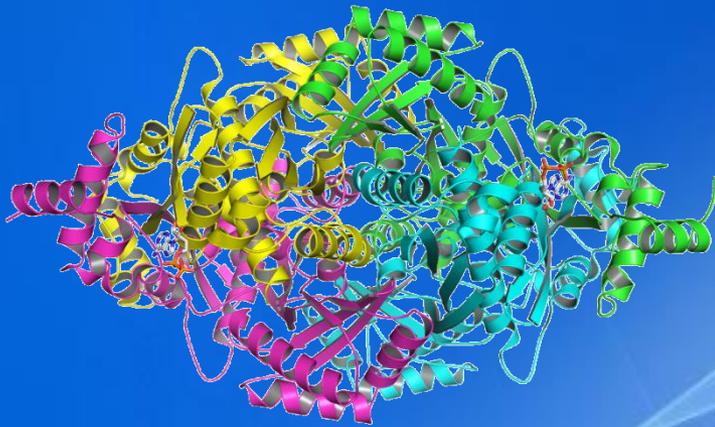
7600080 – Biologia Molecular Estrutural

RECUPERAÇÃO

$$NF = \frac{MÉDIA + RECUPERAÇÃO}{2}$$

Será aprovado o aluno que obtiver nota final igual ou superior a 5,0

Estrutura de Proteínas



Principles that Govern the Folding of Protein Chains

Christian B. Anfinsen

The telegram that I received from the Swedish Royal Academy of Sciences specifically cites "... studies on ribonuclease, in particular the relationship between the amino acid sequence and the biologically active conformation. . . ." The work that my colleagues and I have carried out on the nature of the process that controls the folding of polypeptide chains into the unique three-dimensional structures of proteins was, indeed, strongly influenced by observations on the ribonuclease molecule. Many others, including Anson and Mirsky (1) in the 1930's and Lumry and Eyring (2) in the 1950's, had ob-

eight sulfhydryl groups to form four disulfide linkages take place. The original observations that led to this conclusion were made together with my colleagues Michael Sela and Fred White in 1956-1957 (3). These were, in actuality, the beginnings of a long series of studies that rather vaguely aimed at the eventual total synthesis of the protein. As we all know, Gutte and Merrifield (4) at the Rockefeller Institute, and Ralph Hirschman and his colleagues at the Merck Research Institute (5), have now accomplished this monumental task.

The studies on the renaturation of

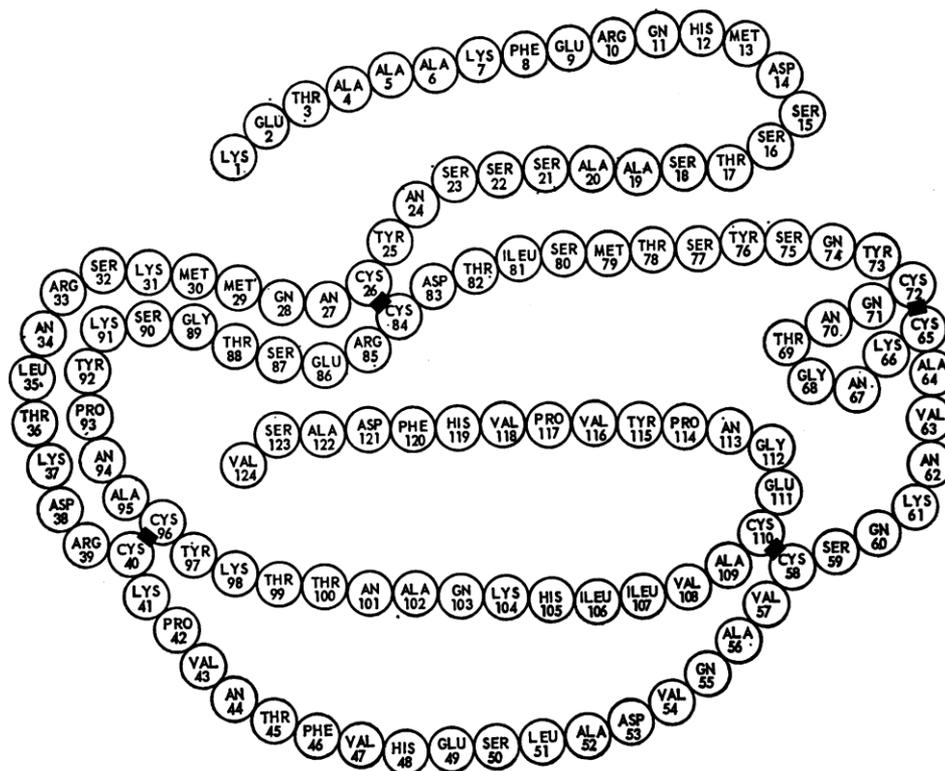
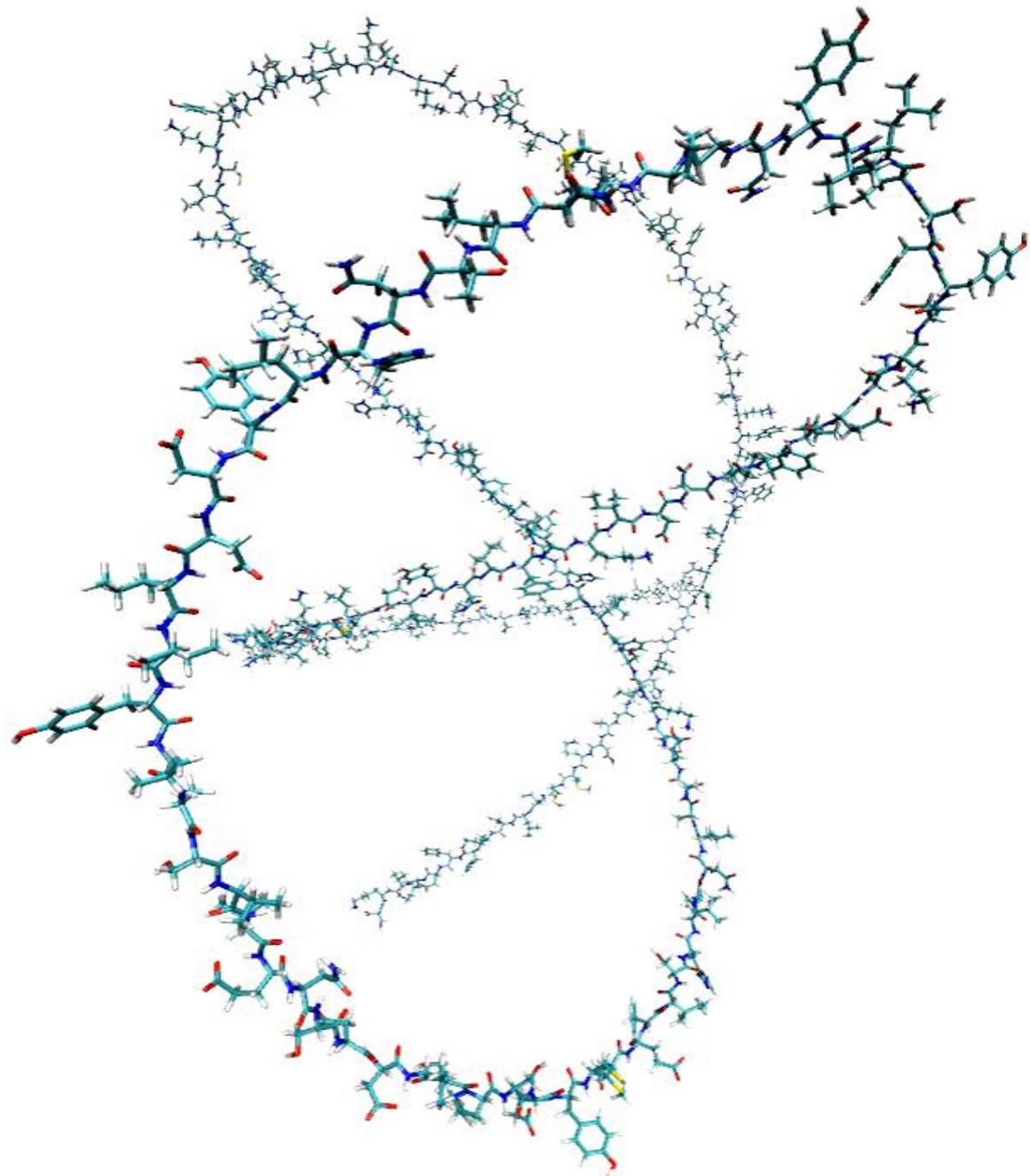


Fig. 1. The amino acid sequence of bovine pancreatic ribonuclease (50)₉





Proteínas são polímeros de aminoácidos unidos entre si através de ligações peptídicas



Os 20 aminoácidos

Nome	Código 3 letras	Código 1 letra	Cadeia Lateral	Característica	Nome	Código 3 letras	Código 1 letra	Cadeia Lateral	Característica
Glicina	Gly	G		Apolar	Serina	Ser	S		Polar
Alanina	Ala	A		Apolar	Treonina	Thr	T		Polar
Prolina	Pro	P		Apolar	Cisteína	Cys	C		Polar
Valina	Val	V		Apolar	Asparagina	Asn	N		Polar
Leucina	Leu	L		Apolar	Glutamina	Gln	Q		Polar
Isoleucina	Ile	I		Apolar	Lisina	Lys	K		Carregados +
Metionina	Met	M		Apolar	Arginina	Arg	R		Carregados +
Fenilalanina	Phe	F		Aromático	Histidina	His	H		Carregados +
Tirosina	Tyr	Y		Aromático	Ácido Aspártico	Asp	D		Carregados -
Triptofano	Trp	W		Aromático	Ácido Glutâmico	Glu	E		Carregados -



As proteínas são organizadas e descritas em quatro níveis hierárquicos de complexidade, sendo cada nível representado de forma distinta



Organização estrutural

Estrutura primária

10 20 30 40 50 60
MPIKVGINGFORIGRMVFAQLEDGLLGTBEIDVVAVVDMNTDAEYFAYQMRVDTVHGKFK

70 80 90 100 110 120
YEVTTKSSPSVAKDDTLVVNGHRILCVKAQRNPADLPWQKLGVEYVIESTGLFTAKAAA

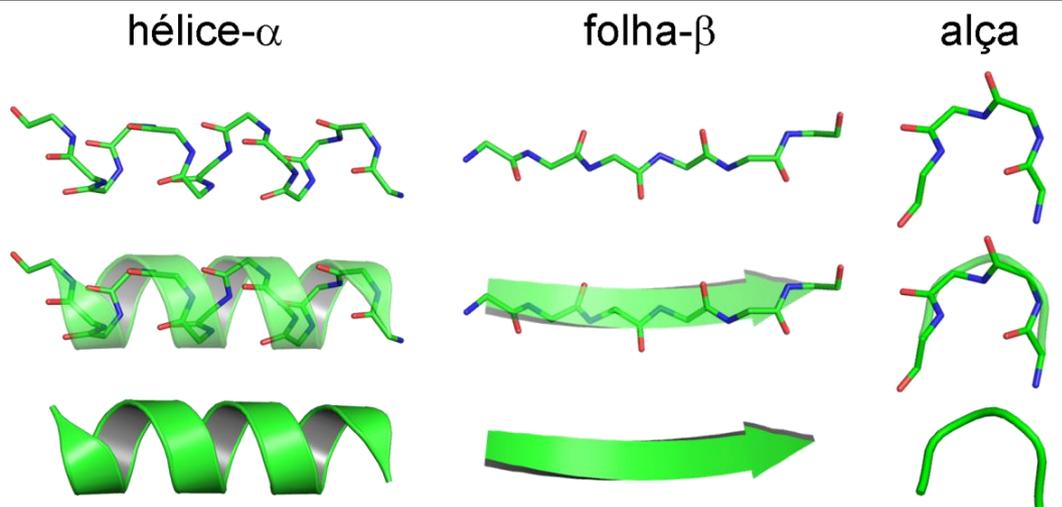
130 140 150 160 170 180
EGHLRGGARKVVISAPASGGAKTLVMGVNHHEYNPSEHHVVSNASCTTNCLAPIVHVLVK

190 200 210 220 230 240
EGFGVQTGLMTTIHSYTATQKITVDGVSVKDWRGRRAAAVNIIPSTTGAAKAVGMVIPSTQ

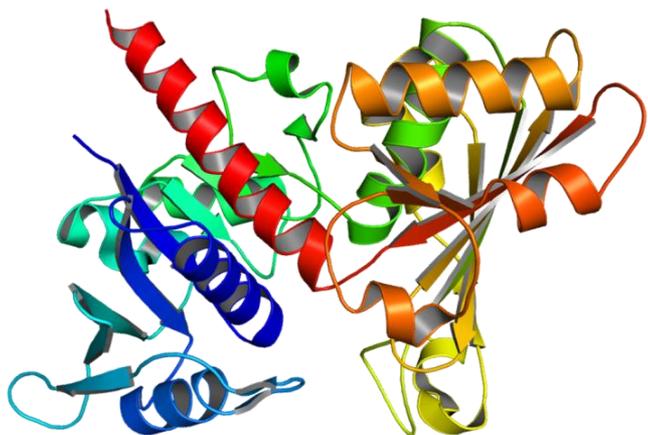
250 260 270 280 290 300
GKLTGMSFRVTPPDVSVVDLFTTAARDTSIQEIDAALKRASKTYMKGILGYTDEELVSAD

310 320 330 340 350
FINDNRSSIYD SKATLQNNLPKERRFKIVSWYDNEWGYSHRVVDLVRHMASKDRSARL

Estrutura secundária



Estrutura terciária



Estrutura quaternária

