**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, ...)

**NOMES: xxxxxx e xxxxx**

**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?

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?

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**)

**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).

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?

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** |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |
| **Código 3 letras** |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |
| **Característica** |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |

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*** |
|  |  |  |
| INSERIR FIGURA AQUI | INSERIR FIGURA AQUI | INSERIR FIGURA AQUI |

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

|  |  |
| --- | --- |
| **Exemplo** | **Exercícios** |
|  |  |
|  |  |