

QBQ2505 – Biologia Estrutural

23 de maio de 2023

Exercício 5

Prof. Roberto K. Salinas

Nome:

Projeto 3: minimização de energia

- Em UCSF Chimera gere a estrutura de um peptídeo com a sequência KKKKPXXXX
- Em conformação de α -hélice (-57° , -47°)
- Adicione hidrogênios
- Analise o gráfico de Ramachandran
- Minimize a estrutura em 2000 passos de “steepest descent”, 100 passos de “gradient minimization”, e $\Delta r = 0.2 \text{ \AA}$
- Analise o gráfico de Ramachandran novamente
- **Entregue o gráfico de Ramachandran após a minimização da energia**