

QBQ2505 – Biologia Estrutural - 2023

Provinha 2

27/04/2023

Prof. Roberto K. Salinas

Nome:

1) O sistema GroEL/GroES de *Escherichia coli* auxilia outras proteínas a se enovelarem no citosol. GroEL/GroES promovem o encapsulamento do substrato, evitando que proteínas mal enoveladas agreguem. Observou-se que GroEL sozinha acelera a velocidade de desnovelamento do substrato. Por outro lado, o complexo GroEL-GroES-ATP acelera a velocidade de enovelamento dos substratos. Utilize UCSF Chimera para analisar a estrutura do complexo GroEL-GroES-ADP resolvido por cristalografia (PDB 1AON).

Dica: após baixar as coordenadas do complexo, no menu principal “Favoritos” abra a linha de comando e digite “split”. Em seguida digite “surface”. Esses comandos deverão mostrar a superfície da molécula. Em “Tools” e “Surface/Binding Analysis” escolha a opção “Coulombic Surface Coloring” para colorir a superfície de acordo com as cargas parciais dos átomos. Em seguida, responda às seguintes perguntas:

- Qual é a diferença entre a distribuição de cargas dentro da cavidade do anel *cis* em complexo com GroES e dentro da cavidade do anel *trans*, ou seja, aquele não está em complexo com GroES?
- Como essas diferenças estariam relacionadas à atividade de chaperona exibida pelo complexo GroEL/GroES?
- Qual seria a função do ATP?

2) Use o Google Colab (Google Collaborative Notebook) para o AlphaFold2 para rodar o programa e prever a estrutura tridimensional do domínio XVIPCD, o qual está envolvido na seleção e secreção de substratos do Sistema de Secreção do Tipo IV. Compare a predição com a estrutura experimental depositada no PDB sob o número de acesso 7MU9. Utilize Chimera para calcular o desvio quadrático médio (RMSD) entre cada um dos modelos gerados por AlphaFold2 e o primeiro modelo da estrutura de RMN. A sequência de aminoácidos deste domínio é:

```
GSHMSDPRHPDNAMYNGAVSKLEALGERGGFANRKELEQAAGQIVFESKVSGLQRID  
HVVPNKSGDGGFFAVQGELTDPAMQRVVFVDRNQAQNQPLENSSRQAAEE
```

O Google Colab para AlphaFold2 pode ser acessado em um dos endereços abaixo:

<https://colab.research.google.com/github/sokrypton/ColabFold/blob/main/AlphaFold2.ipynb>

https://colab.research.google.com/drive/1LVPSOf4L502F21RWBmYJJYYLDIOU2N_TL