

QBQ2505 – Biologia Estrutural

23 de maio de 2023

Prof. Roberto K. Salinas

Nome:

Projeto 4: Dinâmica molecular

- Em UCSF Chimera gere a estrutura de um peptídeo com a sequência TLKTMKERWAAD que corresponde à alfa-hélice 1 de VirB7
- Escolha a conformação de partida como sendo uma alfa-hélice, hélice 3_{10} ou fita beta antiparalela
- Siga as instruções do vídeo “exercício_MD_parte1” e “exercício_MD_parte2” para simular a estrutura por 1 ps em uma caixa de moléculas de água
- Use o campo de força AMBER ff99SB
- Repita a simulação iniciando em uma outra conformação (alfa-hélice, hélice 3_{10} , ou fita beta)
- Responda às questões abaixo (em vermelho):
 - 1) Compare os resultados das duas simulações. O que ocorreu com a estrutura do peptídeo durante a simulação?
 - 2) Explique quais são as etapas de uma simulação, e por que elas devem ser executadas nessa ordem?