

QBQ2505 – Biologia Estrutural

23 de maio de 2023

Exercício 7

Prof. Roberto K. Salinas

Nome:

Você recebeu a análise da trajetória de dinâmica molecular de 55 ns da proteína PtB1B no arquivo "trajetorias.csv". A tabela trajetórias.csv contém a evolução temporal dos ângulos diedrais ϕ e ψ dos aminoácidos Asp8 e Ala31. Responda às seguintes questões:

- 1) Faça um histograma dos ângulos ψ do Asp8 e da Ala31. Quantas conformações são visitadas por cada um deles, e qual delas é a mais estável?
- 2) Como você poderia calcular o valor médio desse ângulo para cada um dos dois aminoácidos?
- 3) Qual dos dois aminoácidos seria mais dinâmico? Por quê?