

Medições de distâncias e ângulos em estruturas moleculares

- 1) Descarregar a estrutura da lisozima com código 2vb1.pdb do site do Protein Databank (www.rcsb.org).
- 2) Remover o solvente com o comando "remove solvente"
- 3) Remover os iões com o comando "remove inorganic"
- 4) Remover os ligandos com o comando "remove organic"
- 5) Remover as conformações alternativas com o comando "remove alt b+c"

Propriedades da ligação peptídica:

- 1) Represente a moléculas como *sticks*, usando o comando "as sticks"
- 2) Para facilitar a identificação dos ligações peptídicas e cadeias laterais, vamos colorir de laranja os carbonos alfa com o comando "color orange, name CA"
- 3) Mude o modo de seleção do PyMOL de "residue" para "atom". Quando clicar num átomo com o botão esquerdo do rato, apenas esse átomo será selecionado, e não o resíduo inteiro
- 4) Selecione os átomos pertencentes a uma ligação peptídica, clicando sobre eles (Sugestão: os átomos da ligação peptídica terão de estar entre dois carbonos alfa, que se encontram coloridos de laranja)
- 5) No menu de objetos, clique com o botão direito do rato sobre a letra "A" do objeto "(sele)" e escolha a opção "rename selection". Introduza o nome "peptide_bond". Ainda no menu "A" escolha a opção "zoom" para centrar a visão nessa ligação peptídica.
- 6) Para fazer medições de distâncias, ângulos e ângulos diedros (torsões), vamos usar os comandos "distance", "angle" e "torsion".
- 7) Use a combinação "Tecla Ctrl + botão esquerdo do rato" para selecionar 2, 3 ou 4 átomos. Note que os átomos selecionados são representados por esferas com 1, 2, 3 ou 4 estrias e são internamente descritos pelos nomes "pk1", "pk2", "pk3" e "pk4" (pk – "pick")
- 8) Após selecionar dois átomos pelo processo acima, o comando "distance" criará um objecto permanente representado a distância entre esses dois átomos
- 9) Após selecionar três átomos, o comando "angle" criará um objeto permanente representado o ângulo formado por esses três átomos
- 10) Após selecionar quatro átomos pelo processo acima, o comando "dihedral" criará um objeto permanente representando o ângulo diedro formado pelos 4 átomos.
- 11) Compare a distância da ligação peptídica C-N com a distância de outras ligações C-N na mesma molécula (por exemplo em resíduos de lisina ou arginina). Observa discrepância?
- 12) Meça as distâncias em outras ligações peptídicas e confirme a reprodutibilidade dos resultados.
- 13) Confirme a planaridade da ligação peptídica usando o comando "dihedral" após selecionar os seguintes átomos da ligação peptídica: "CA", "C", "N", "CA" (o primeiro e último "CA" são carbonos alfa de resíduos consecutivos). NOTA: o ângulo deverá ser próximo de 180 graus.

Raios atômicos e contactos de van der Waals:

- 1) Adicione a representação *spheres* à molécula 2vb1 usando o comando “show spheres”
- 2) Torne as esferas parcialmente transparentes com o comando “set sphere_transparency, 0.3”
- 3) Procure pares de átomos dos elementos C, O e N *não ligados* que estejam à distância de contacto e meça a distância entre os seus centros. O raio atômico será dado pela metade da distância interatômica
- 4) Verifique a aditividade dos raios atômicos calculados a partir de pares de átomos idênticos usando outros pares de átomos à distância de contacto, mas de elementos *diferentes*.