

## BLOCO 1 – ATIVIDADE 1

### ESTRUTURA DAS PROTEÍNAS

Autoria:

Elaine Machado Benelli (Departamento de Bioquímica e Biologia Molecular, UFPR)

#### **Objetivo:**

Visualizar as proteínas e compreender suas características estruturais e algumas propriedades físico-químicas.

#### **Método:**

Para visualizar as estruturas será utilizado o JMOL, um programa de visualização de estruturas química 3D de livre acesso, disponível online.

#### **Background:**

Nas representações moleculares, os átomos são representados por esferas das seguintes cores:

- . branco – Hidrogênio (H)
- . cinza – Carbono (C)
- . azul – Nitrogênio (N)
- . vermelho – Oxigênio (O)
- . amarelo – Enxofre (S)
- . laranja – Fósforo (P)

*Comandos de movimento dos modelos estruturais no JSMOL:*

*Aumentar e diminuir o tamanho: tocar sobre o modelo, pressionar a tecla shift ao mesmo tempo que move o mouse para frente ou para trás;*

*Girar o modelo: Apertar o botão esquerdo do mouse e movimentá-lo da esquerda para a direita.*

ATENÇÃO: Fotografar todos os passos para adicionar no relatório final.

## 1) ÁGUA

1.1) Estrutura:

<http://www.biotopics.co.uk/jsmol/watersingle.html>

Esta imagem representa a estrutura da água. Ao clicar em “Click to see/ hide more detail about electron in water”, você será capaz de observar a distribuição e compartilhamento de elétrons entre os átomos de H e O.

- a) A ligação entre H e O é de que tipo?
- b) Esta ligação pode ser quebrada quando a água passa do estado líquido para gasoso?

Clicando em “**Show**/remove lone pairs (eletron probability envelopes)” aparecerá para você a região que corresponde a posição dos dois pares de elétrons não compartilhados do O. A seguir, clicar em “**MEP - (blue:+ve, red -ve)**/ MEP off”. Você será capaz de visualizar uma região vermelha que representa polaridade negativa devido a densidade maior de elétrons e em azul a polaridade positiva devido a maior densidade de prótons.

a) Esta diferença de polaridade pode favorecer algum tipo de interação entre as moléculas de água ou com outra molécula? Explique.

1.2) Ligações (pontes) de hidrogênio na água (líquido)  
<http://www.biotopics.co.uk/jsmol/waterHbonds.html>

Esta imagem representa a estrutura da água líquida. Ao clicar em “**Show...hide H bonds**”, aparecerão em azul as ligações de H.

- Se aquecermos a água 100°C o que acontece com este tipo de ligação? Explique.
- Por que este tipo de ligação acontece entre O e H e não entre átomos de O ou átomos de H?
- Quantas ligações de H são observadas por molécula de água?

1.3) Ligações (pontes) de hidrogênio na água (sólido)  
<http://www.biotopics.co.uk/jsmol/ice.html>

Esta imagem representa a estrutura da água no estado sólido. Ao clicar em “**Show...hide H bonds**”, aparecerão em azul as ligações de H.

- Quantas ligações de H são observadas pelas moléculas de água mais centrais?
- O que acontece com estas ligações de H na passagem do estado sólido para o líquido?

1.4) Movimentação das moléculas  
<http://www.biotopics.co.uk/jsmol/watermoving.html>

Clique em “**Start... Stop animation**”

- Pelo modelo demonstrado, poderíamos afirmar que a estrutura organizada da água líquida é estática?

## 2) PROTEÍNAS

2.1) Estrutura dos aminoácidos  
[http://www.biotopics.co.uk/jsmol/aa\\_categories.html](http://www.biotopics.co.uk/jsmol/aa_categories.html)

- Abra o link do aminoácido “alanina” e movimente sua estrutura, deixando o C $\alpha$  no centro, grupo amino à esquerda, carboxílico a direita e o grupo R (cadeias laterais) para baixo. Fotografe e insira a figura aqui.
- Abra os links dos aminoácidos “glicina”, “alanina”, “isoleucina”, “leucina”, “metionina” e “valina”, posicionando os aminoácidos como descrito no item 4.1.a. Observe as cadeias laterais destes aminoácidos. Quais os átomos que são encontrados? Qual a polaridade destes grupos R? Explique.
- Abra os links dos aminoácidos “arginina”, “lisina” e “histidina”, posicionando os aminoácidos como descrito no item 4.1.a. Observe as cadeias laterais destes

aminoácidos. Quais os átomos que são encontrados? Qual a polaridade destes grupamentos R? Explique.

- d) Abra os links dos aminoácidos “aspartato” e “glutamato” posicionando os aminoácidos como descrito no item 4.1.a. Observe as cadeias laterais destes aminoácidos. Quais os átomos que são encontrados? Qual a polaridade destes grupamentos R? Explique.
- e) Abra os links dos aminoácidos “triptofano”, “tirosina” e “fenilalanina”, posicionando os aminoácidos como descrito no item 4.1.a. Observe as cadeias laterais destes aminoácidos. Quais os átomos que são encontrados? Qual a polaridade destes grupamentos R? Explique.
- f) Abra os links dos aminoácidos “treonina”, “serina” e “cisteína”, posicionando os aminoácidos como descrito no item 4.1.a. Observe as cadeias laterais destes aminoácidos. Quais os átomos que são encontrados? Qual a polaridade destes grupamentos R? Explique.
- g) Abra os links dos aminoácidos: “asparagina” e “glutamina”, posicionando os aminoácidos como descrito no item 4.1.a. Observe as cadeias laterais destes aminoácidos. Quais os átomos que são encontrados? Qual a polaridade destes grupamentos R? Explique.
- h) Quais os dois aminoácidos que apresentam enxofre em suas cadeias laterais? Ambos podem formar pontes de sulfeto na estrutura de proteínas? Por quê?

## 2.2) Ligação peptídica

<http://www.biotopics.co.uk/jsmol/leuala.html>

- a) Mova a estrutura colocando o N-terminal para esquerda. Identifique a ligação peptídica. Fotografe e coloque aqui. Os átomos envolvidos nesta ligação estão no mesmo plano? Por quê?
- b) Que grupos funcionais participaram desta ligação?

## 2.3) Estrutura tridimensional

<http://www.biotopics.co.uk/jsmol/insulin.html>

- a) Neste link visualizamos a estrutura 3D no hormônio insulina. Clique em “Display A,B chains as ribbons”. Que tipo de estrutura é visualizada? Que região da cadeia polipeptídica corresponde aos desenhos observados?
- b) Coloque o eixo da estrutura visualizada em “a”, perpendicular ao plano de sua mesa de trabalho. Agora clique em “Show/ hide backbone H bonds”. Que tipo de interações são responsáveis por manter a estrutura observada em k?
- c) Clicar em “ball and sticks”. Agora, podemos visualizar todos os átomos desta proteína. Qual a orientação das cadeias laterais dos aminoácidos?
- d) Clicar em “reset view” e clique em “Display A,B chains as ribbons”. Em seguida, clique em “Display cysteines”, em “show disulphide bridges” e finalmente em “Show/ hide backbone H bonds”.
- e) Qual o maior nível estrutura da insulina? Quais os tipos de interações responsáveis por manter este nível estrutura?
- f) Quais as estruturas secundárias observadas em sequência na cadeia A e na cadeia B? Que tipos de interações mantem a estabilidade destas estruturas?

## 3) SIMULAÇÕES DO EFEITO DO SOLVENTE NA ESTRUTURA PROTEICA

Acesse o link: [https://www.labxchange.org/library/items/lb:LabXchange:ad1abe9f:lx\\_simulation:1](https://www.labxchange.org/library/items/lb:LabXchange:ad1abe9f:lx_simulation:1)

- a) Clicar em iniciar a simulação, “generate a random protein, water” e aperte o botão do “play”. A proteína começa a mexer e se reorganizar. Aperte o “pause” depois de alguns segundos e descreva os tipos de aminoácidos (polaridade) observados no interior e no exterior da proteína. Explique
- b) Agora com o mesmo modelo, modifique o solvente para “oil”. Aguarde a reorganização da proteína e aperte o pause depois. Descreva os tipos de aminoácidos (polaridade) observados no interior e no exterior da proteína. Explique.
- c) Escolha “all hydrophobic” em “oil” e aperte o “play”. Explique os resultados.
- d) Escolha “all hydrophobic” em “water” e aperte o “play”. Explique os resultados.
- e) Escolha “all hydrophilic” em “oil” e aperte o “play”. Explique os resultados.
- f) Escolha “all hydrophilic” em “water” e aperte o “play”. Explique os resultados.

#### 4) SIMULAÇÕES DO EFEITO DA TEMPERATURA NA ESTRUTURA PROTEICA

Acesse o link: [https://www.labxchange.org/library/items/lb:LabXchange:4dff76f7:lx\\_simulation:1](https://www.labxchange.org/library/items/lb:LabXchange:4dff76f7:lx_simulation:1)

Antes de iniciar a simulação, clique “Reset”. Fotografe o que é observado antes de iniciar o experimento e a cada atividade.

- a) Aumente lentamente a temperatura e observe o que acontece até atingir a temperatura máxima. Qual o tipo de ligação mantida mesmo com o aquecimento da proteína?
- b) Diminua a temperatura lentamente e observe o resultado. Explique.
- c) Diminua a temperatura bruscamente e observe o resultado. Explique.
- d) Com o resfriamento, quais ligações são restabelecidas? A organização inicial é recuperada? Explique.