** **

**Programa de Pós-graduação em Biotecnologia - UFSCar**

**BIT-768 - BIOINFORMÁTICA I**

***Profa. Dra. Ignez Caracelli* (DF)**

***Prof. Dr. Julio Zukerman Schpector* (DQ)**

**17 de abril de 2019**

**SALA**: enviar até o final da aula para bit.603@gmail.com

**Exercício 10: Interações**

Baixe a proteína testeNPS

Visualize o arquivo dsv apenas o monômero A da proteína e os ligantes NPS1, NPS2 e NPS3.

Coloque os hidrogênios.

1. Observe o ligante NPS1 e aminoácido 390. Qual o aminoácido 390?
2. Faça uma figura com
3. centroide Ct1 (C1-C2-C3-C4-C5-C6) do ligante NPS1
4. meça a distância da interação pi do Ct1 com o OD1 do aminoácido 390
5. faça o desenho, em fundo branco, da interação tipo π, O⋯Ct1 (C1-C2-C3-C4-C5-C6).
6. insira no documento.
7. Preencha a Tabela.

|  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- |
| **interação (tipo)** | **distância (Å)** | **receptor** | **ligante** |
|  |  |  |  |
|  |  |  |  |
|  |  |  |  |

interação (tipo) → O⋯π, CH⋯π, NH⋯π, etc.

receptor→ indicar átomo ou centroide , aminoácido, cadeia (A, B,..)

centroide Ct(C1-N2-C3-N5....)

ligante→ indicar átomo ou centroide , aminoácido, cadeia (A, B,..)

centroide Ct(C1-N2-C3-N5....)

**Exercício 10A: Interações**

**CASA**:

Para ser respondido e enviado para bit.603@gmail.com **até segunda**, dia 22 de abril de 2019

1. Observe os ligantes NPS2 e NPS3
2. Verifique se há alguma interação tipo CH⋯π entre o ligante **NPS2** e a proteína. Se houver, indique
3. qual é a interação (preencha a Tabela abaixo)
4. insira no documento a figura com a interação .
5. Verifique se há interações do tipo CH⋯π entre o ligante **NPS3** e a proteína. Se houver, indique
6. qual é a interação (preencha a Tabela abaixo)
7. insira no documento a figura com a interação .

|  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- |
| **interação (tipo)** | **distância (Å)** | **receptor** | **ligante** |
|  |  |  |  |
|  |  |  |  |
|  |  |  |  |

interação (tipo) → O⋯π, CH⋯π, NH⋯π, etc.

receptor→ indicar átomo ou centroide , aminoácido, cadeia (A, B,..)

centroide Ct(C1-N2-C3-N5....)

ligante→ indicar átomo ou centroide , aminoácido, cadeia (A, B,..)

centroide Ct(C1-N2-C3-N5....)