**16 de outubro de 2019**

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

**Programa de Pós-graduação em Física – UFSCar**

***Interacoes não covalentes - NCI***

**Profa. Ignez Caracelli**

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

**Exercício 6: 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....)

1. Indique as coordenadas do centroide.
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. Indique as coordenadas do centroide.

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

1. Verifique se há interações do tipo CH⋯π entre o ligante **NPS3** e a proteína. Se houver, indique
2. qual é a interação (preencha a Tabela abaixo)
3. insira no documento a figura com a interação .
4. Indique as coordenadas do centroide.

|  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- |
| **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....)