

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
 - (a) centroide Ct1 (C1-C2-C3-C4-C5-C6) do ligante NPS1
 - (b) meça a distância da interação pi do Ct1 com o OD1 do aminoácido 390
 - (c) faça o desenho, em fundo branco, da interação tipo π , $O \cdots Ct1$ (C1-C2-C3-C4-C5-C6).
 - (d) insira no documento.
3. Preencha a Tabela.

interação (tipo)	distância (Å)	receptor	ligante

interação (tipo) $\rightarrow O \cdots \pi$, $CH \cdots \pi$, $NH \cdots \pi$, etc.

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

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

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

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

4. Indique as coordenadas do centroide.

5. Verifique se há alguma interação tipo $\text{CH}\cdots\pi$ entre o ligante **NPS2** e a proteína. Se houver, indique
- (a) qual é a interação (preencha a Tabela abaixo)
 - (b) insira no documento a figura com a interação .
 - (c) Indique as coordenadas do centroide.

interação (tipo)	distância (Å)	receptor	ligante

6. Verifique se há interações do tipo CH... π entre o ligante **NPS3** e a proteína. Se houver, indique
- (a) qual é a interação (preencha a Tabela abaixo)
 - (b) insira no documento a figura com a interação .
 - (c) 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....)