



Exercício 12

Para a questão 1, você utilizará os arquivos da estrutura da resolvida da estreptavidina (estreptavidina.pdb), da ligante biotina (biotina.pdb) e da estreptavidina associada à biotina (complexo_estreptavidina-biotina.pdb) fornecidas na página da disciplina.

1. Entre na página <http://hexserver.loria.fr/index.php> e submeta os arquivos para o experimento de atração molecular em parametros *default*. Baixe o arquivo de pdb com o melhor resultado. Utilize o Chimera para verificar o experimento de atração molecular obtidos na página <https://www.cgl.ucsf.edu/chimera/download.html>. Você deverá baixar e instalar o programa de acordo com seu sistema operacional. Abra o arquivo em seguida responda as questões abaixo.

- a.- Qual o a localização do sítio ativo da proteína?
- b.- Existe alguma diferença entre a conformação inicial da proteína e a conformação depois de associada ao ligante?
- c.- Compare o pdb obtido pelo experimento com a estrutura resolvida associada ao ligante.

2.- Classifique a dificuldade desse exercício: A) Fácil demais, fiz durante a aula e sobrou tempo; B) Adequado, fiz dentro do tempo programado; C) Um pouco puxado, tive que deixar uma parte para fazer em casa; D) Puxadíssimo, fiquei vários dias debruçado sobre um computador.

Envie as respostas desse exercício para o email diegotsouza@hotmail.com com cópia para srmatiol@ib.usp.br, com assunto da mensagem [BIO-0456] Exercício 12. NÃO ESQUEÇA DE IDENTIFICAR-SE.