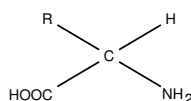


QBQ1252: Bioquímica Metabólica – Química

Lista de exercícios 2.

1. Escolha um aminoácido qualquer. Ele pode ser encontrado em solução aquosa predominantemente no seguinte estado de protonação? Por que?



2. Desenhe o tripeptídeo Asp-His-Ala. Qual o seu pI? Qual a sua carga líquida em pH=1, pH=6 e pH=12? Explique como chegou nestes resultados.
3. Classifique os aminoácidos em termos da natureza química dos seus grupos radicais: a) ionizáveis ou não ionizáveis, b) ácidos ou básicos, c) polares ou não polares, d) hidrofílicos ou hidrofóbicos, e) alifáticos ou aromáticos, f) lineares ou ramificados e g) pequenos e grandes.
4. Diferencie estrutura secundária e terciária de uma proteína. Dê exemplos. Descreva as diferenças entre α -hélices e folhas- β . Observe um gráfico de Ramachandran e discuta por que os valores de ϕ e ψ estão correlacionados com a estrutura secundária.
5. Polímeros de ác. glutâmico (poli-Glu) e de lisina (poli-Lys) possuem estrutura ou de α -hélice ou de mola randômica (desenovelada), em função do pH da solução aquosa. Explique qual a estrutura de cada polímero em meio ácido e em meio básico.
6. Proteínas como a Bacteriorodopsina possuem α -hélices que atravessam a membrana celular. Estime quantos aminoácidos serão necessários em cada α -hélice trans-membranar para atravessá-la totalmente. De exemplos de aminoácidos que poderiam e que não poderiam ser encontrados nesta α -hélice e explique por que.
7. Navegue até o web-site do PDB (www.rcsb.org), obtenha o PDB ID 3MI4 e responda aos seguintes itens:
 - (a) Identifique a proteína e escreva um breve parágrafo sobre sua função biológica;
 - (b) No sítio do PDB, encontre o item “Small Molecules” e liste os 4 ligantes não-proteicos na estrutura. Um dos ligantes, benzamidina, tem a afinidade listada. Defina afinidade e relacione com a energia livre de complexação. Como você pode obter o valor desta energia livre a partir da afinidade?
 - (c) Utilize a função “Ligand Explorer” e liste as ligações de hidrogênio que contribuem para a ligação da benzamidina (liste os resíduos envolvidos e a distância doador-aceptor para pelo menos duas ligações de hidrogênio). Caso a função “Ligand Explorer” não funcione em seu computador, você pode tentar responder estas questões usando outro programa de visualização como o PyMol. Veja o site da disciplina para mais detalhes.
 - (d) Quais contatos hidrofóbicos estão presentes para benzamidina (liste os resíduos e grupos envolvidos)?
 - (e) Como o íon cálcio presente na estrutura interage com a proteína (novamente, liste os contatos envolvidos)? Qual o papel deste íon?