



Lista de exercícios 3

1. O que é efeito hidrofóbico? Qual o seu papel no enovelamento proteico? E na manutenção da estrutura terciária das proteínas? Explique termodinamicamente sua resposta.
2. O que são enzimas reguladas alostericamente? Use gráficos esquemáticos de $V_0 \times [S]$ e compare uma enzima cuja cinética segue uma equação de Michaelis-Menten com uma enzima alostérica positiva e com uma enzima alostérica negativa.
3. A velocidade inicial de uma reação enzimática, V_0 , em função da concentração do substrato $[S]$, na ausência e na presença dos inibidores A e B segue os dados da tabela abaixo:

[S] (μM)	$V_0(\mu M \cdot min^{-1})$		
	Sem inibidor	inibidor A	inibidor B
1,25	1,72	0,98	1,01
1,67	2,04	1,17	1,26
2,5	2,63	1,47	1,72
5,0	3,33	1,96	2,56
10,0	4,17	2,38	3,49

- (a) Desenhe os gráficos de $V_0 \times [S]$ e de $1/V_0 \times 1/[S]$ na ausência e na presença dos inibidores A e B;
 - (b) Determine V_{max} e K_M para a reação do substrato puro e para cada reação inibida;
 - (c) Qual é a classe dos inibidores A e B?
4. Consulte um dos livros de bioquímica sugeridos como bibliografia e procure o mecanismo molecular de reação de uma oxidoredutase e de uma quinase. Para cada uma destas enzimas, cite seu nome e a reação (reagentes e produtos) catalisada. Cite se coenzimas e/ou grupos prostéticos participam da reação catalisada e descreva sua função.
 5. Qual espécie ao longo da coordenada de uma reação enzimática é mais estabilizada, em comparação com a mesma reação em solução aquosa na ausência de catalizador? Por que a desestabilização do estado reagente ou de um complexo de Michaelis contribui limitadamente para a aceleração da velocidade de uma reação enzimática?
 6. Qual a principal força intermolecular responsável pela catálise enzimática? Qual a diferença no papel desta força em solução aquosa e no sítio ativo da enzima. De um exemplo de enzima e seu respectivo mecanismo de catálise, indicando os grupos catalíticos que utilizem esta força intermolecular para catálise.
 7. A taxa de hidrólise de uréia catalisada pela enzima urease é 10^{14} maior do que a hidrólise na ausência de catalizador. Se uma dada quantidade de uréia é hidrolisada completamente na presença de urease em 5 minutos, calcule em quanto tempo a mesma quantidade de uréia seria hidrolisada na ausência do catalizador, com todas as outras condições do meio equivalentes.



8. Anidrase carbônica catalisa a hidratação reversível de CO_2 : $\text{H}_2\text{O} + \text{CO}_2 \rightleftharpoons \text{H}_2\text{CO}_3$. Este é um importante processo para transportar CO_2 dos tecidos até o pulmão. Se $10,0 \mu\text{g}$ de anidrase carbônica pura catalisa a hidratação de $0,30 \text{ g}$ de CO_2 em 1 minuto a 37°C na sua velocidade máxima (V_{max}), calcule o k_{cat} (também chamado de número de ciclos de catálise, ou “turnover”) da anidrase carbônica.
9. Obtenha os PDB IDs 1PKL, 3E0V, 3E0W, correspondentes à piruvato quinase de Leishmania. Esta enzima tem estrutura quaternária tetramérica e sofre regulação alostérica. Responda aos seguintes itens:
- Identifique quais estruturas pertencem ao estado tenso e ao estado relaxado. Exemplifique os efetores naturais, se são homotrópicos ou heterotrópicos e indique como o análogo presente na cristalização interage com seus sítios proteicos. Liste os contatos envolvidos;
 - Você consegue identificar mudanças na estrutura do sítio de ligação que poderiam determinar a diferença de afinidade entre o estado relaxado e o estado tenso?