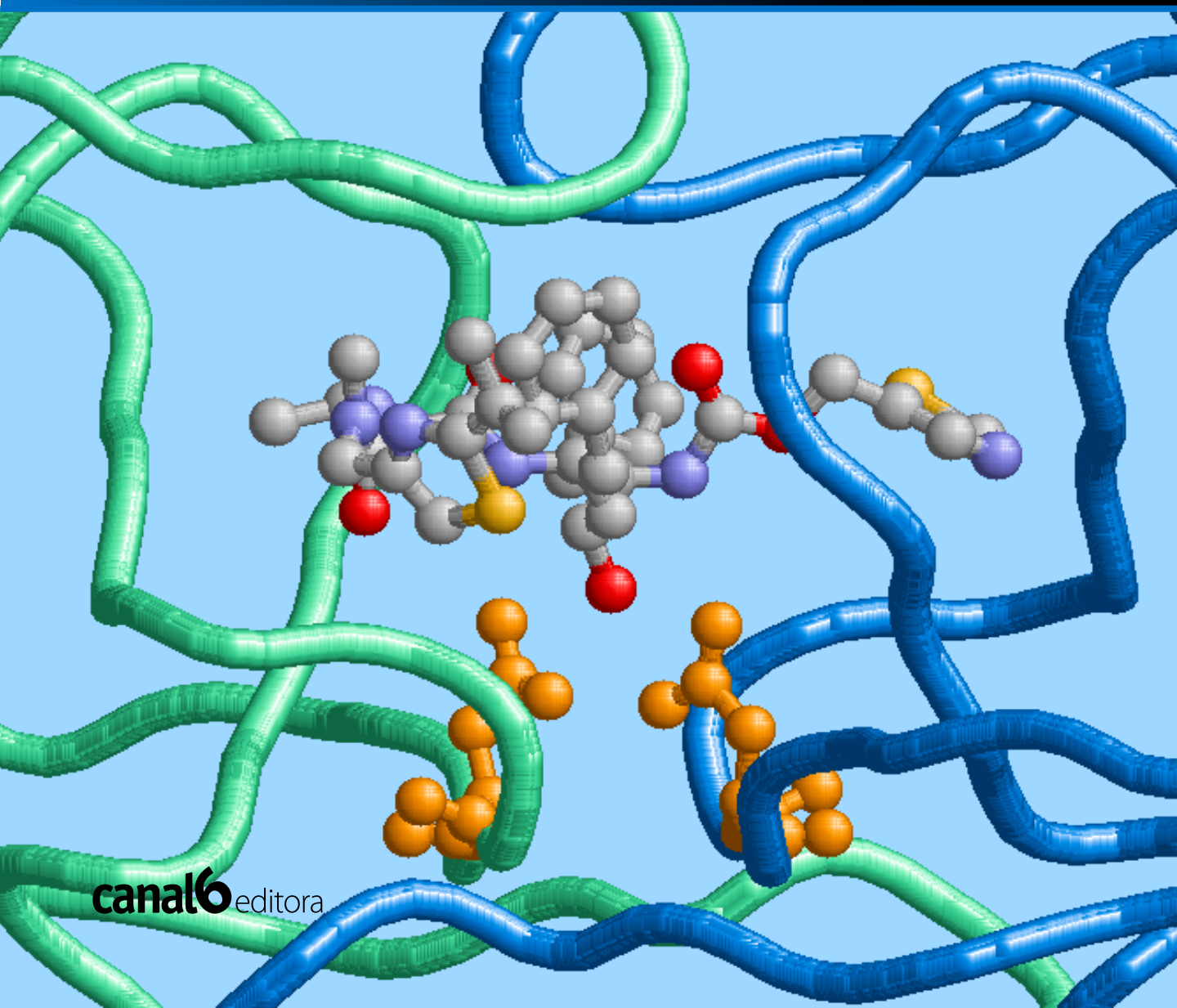


Proteínas envolvidas em Patologias

Volume 3

Renato Massaharu Hassunuma
Patrícia Carvalho Garcia
Sandra Heloísa Nunes Messias (orgs.)



Proteínas envolvidas em Patologias Volume 3

Renato Massaharu Hassunuma

Professor Titular da Universidade Paulista - UNIP,
campus Bauru

Patrícia Carvalho Garcia

Coordenadora do Curso de Biomedicina da Universidade Paulista - UNIP,
campus Bauru

Sandra Heloísa Nunes Messias

Coordenadora Geral do Curso de Biomedicina da Universidade Paulista – UNIP

1ª Edição / 2018
Bauru,SP

canal6 editora

© Renato Massaharu Hassunuma.

Conselho Editorial:

BIOMÉDICA ANA LAURA SENEDA

Mestranda em Bases Gerais da Cirurgia - Faculdade de Medicina de Botucatu – Universidade Estadual Paulista Júlio de Mesquita Filho (UNESP)

BIOMÉDICA KELLY COLUSSI PINHEIRO PRECIPITO

Especialista em Reprodução Humana Assistida pela Associação Instituto Sapientiae

BIOMÉDICA LETÍCIA GRAZIELA COSTA SANTOS

Mestranda em Bioinformática - Universidade Federal do Paraná (UFPR)

Capa:

Figura desenvolvida a partir do arquivo 1HXW.pdb referente à protease do HIV-1 ligada ao fármaco ritonavir, determinada por técnica de difração de raios X em resolução de 1,8 Å.

Design:

Eduardo Marques Raboni, Phillipe Franklin Coelho Magalhães e Prof. Dr. Renato Massaharu Hassunuma

canal6 editora

Rua Machado de Assis, 10-35
Vila América | CEP 17014-038 | Bauru, SP
Fone/fax (14) 3313-7968 | www.canal6.com.br

CIP – Brasil. Catalogação na Publicação

H355p

Proteínas envolvidas em patologias:
Volume 3 / Renato Massaharu
Hassunuma, Patrícia Carvalho Garcia e
Sandra Heloísa Nunes Messias. - Bauru:
Canal6, 2018.

Inclui bibliografia

53 f. : il. color.

ISBN: 978-85-7917-481-0

1. Bioquímica. 2. Bioinformática.
3. Patologia. I. Hassunuma, Renato
Massaharu. II. Garcia, Patrícia
Carvalho. III. Messias, Sandra Heloísa
Nunes. IV. Título

CDU: 577.1:616

Agradecimentos

Nossos agradecimentos

A todos os alunos do Curso de Biomedicina da Universidade Paulista – UNIP, campus Bauru, que participaram com dedicação e afinho neste projeto.

Nossos agradecimentos especiais

Pelo apoio no desenvolvimento deste e-book e em projetos do Curso de Biomedicina da UNIP – Bauru agradecemos:

Prof. Aziz Kalaf Filho,
Diretor da Universidade Paulista – UNIP, campus Bauru,

Prof. Dr. Paschoal Laércio Armonia,
Diretor do Instituto de Ciências da Saúde da Universidade Paulista - UNIP

Biomédica Ana Laura Seneda
*Mestranda em Bases Gerais da Cirurgia - Faculdade de Medicina de Botucatu –
Universidade Estadual Paulista Júlio de Mesquita Filho (UNESP)*

Biomédica Kelly Colussi Pinheiro Precipito
Especialista em Reprodução Humana Assistida pela Associação Instituto Sapientiae

Biomédica Leticia Graziela Costa Santos
Mestranda em Bioinformática - Universidade Federal do Paraná (UFPR)

E a todos que diretamente ou indiretamente colaboraram com este livro,

Prof. Dr. Renato Massaharu Hassunuma
Prof. Dra. Patrícia Carvalho Garcia
Prof. Dra. Sandra Heloísa Nunes Messias

Sumário

1	Introdução	7
	Renato Massaharu Hassunuma, Profa. Dra. Patrícia Carvalho Garcia e Profa. Dra. Sandra Heloísa Nunes Messias	
2	Proteína supressora de tumor p53	8
	Alice Ometto, Amanda Giovana Pazelli da Silva e Amanda Gonçalves	
3	Glicoproteínas gp41 e gp120 do envelope do HIV-1	11
	Beatriz Casemiro e Vitória Letícia dos Santos	
4	Protease do HIV-1	14
	Eduardo Marques Raboni e Phillipe Franklin Coelho Magalhães	
5	Hemaglutinina do vírus influenza H1 1918	17
	Ana Paula Dellai de Souza e Larissa Granna da Silva Leite	
6	Neuraminidase do vírus influenza H2N2	20
	Kamila Mayara Teixeira, Thayná Aparecida Pultrini Dias e Vinícius Alexander Feitosa	
7	Proteínas E e M do vírus da Zika	23
	Amanda Antonio de Souza, Amanda de Oliveira Pereira e Caroline Haneda Xavier	
8	Antígeno protetor do antraz	26
	Amanda Aparecida Ramos, Pamela Dominique de Oliveira e Raquel Caroline Rodrigues	
9	Fator letal do antraz	29
	Caroline Nobrega Rodrigues de Lara, Diana Mayumi Honna e Rafael Aparecido Turcarelli	

10	DD-peptidase do <i>Streptomyces</i> sp. R61	32
	Emily Thalia Teixeira da Silva, Gabriela Duarte Correia de Melo e Maryana de Castro Lourenço Bastos	
11	Fragmento 121-230 da proteína priônica celular humana	35
	Fábio Henrique Ferreira, Manuela Trovarelli Presente, Matheus Henrique Bernardo, Matheus Marques de Carvalho e Yasmin Costa	
12	Fibrila beta-amiloide	38
	Micaela Gabrielle Rodrigues Fernandes	
13	Glicoproteínas GP1 e GP2 do envelope do vírus Ebola	41
	Fernanda Alves Tavares, Giovana Roberta Salado e Larissa Beatriz Barboza	
14	Proteína p24 do capsídeo do HIV-1	44
	Ana Laura Bonfanti Nicoleti, Leticia Casares Matrone, Nayane Orestes Marcelo e Susane Coutinho	
15	Proteína E do envelope do vírus da dengue	47
	Giovana Cristina Sanches Ferreira, Juliana da Silva Migliorini e Mariana Moraes Lopes	
16	Toxina diftérica	50
	Ingrid Fernanda da Silva, Juliana Coradi Mazziero e Maria Clara Adriano Ribeiro	

1 Introdução

Neste livro, os autores de cada capítulo recriaram os scripts apresentados nos e-books **Proteínas envolvidas com Patologias – Volume 1** e **Proteínas envolvidas com Patologias – Volume 2**, publicados pela Canal 6 Editora.

A obra foi resultado das atividades desenvolvidas por alunos do 2º ano do Curso de Biomedicina para a **XII EXPOLAB – Exposição do Laboratório Escola de Biomedicina** da Universidade Paulista – UNIP, campus Bauru, durante o primeiro semestre de 2018.

Em cada capítulo é apresentado um novo script desenvolvido para as proteínas descritas nos volumes anteriores. Foram utilizados arquivos com extensão .pdb, os quais foram obtidos gratuitamente no site Protein Data Bank (Disponíveis para download gratuito em: <https://www.rcsb.org/>).

A partir dos arquivos PDB selecionados, foram desenvolvidos scripts para o software RasMol (Disponível para download gratuito em: <http://www.openrasmol.org/>).

Para mais informações sobre as proteínas apresentadas, sugerimos a consulta dos volumes anteriores desta coleção.

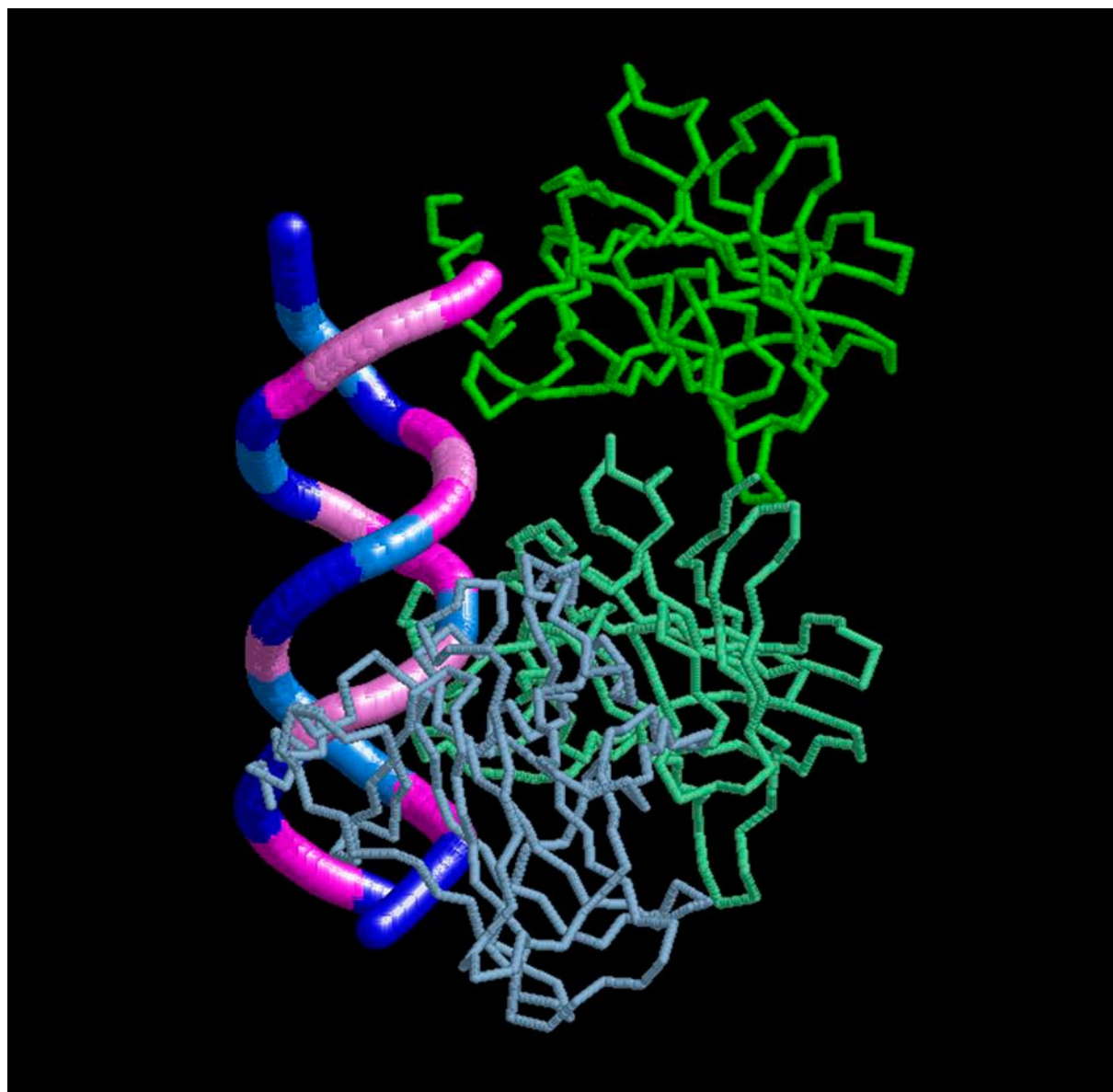
2 Proteína supressora de tumor p53

Para observação da proteína supressora de tumor p53 humana ligada a um trecho de DNA foi utilizado o arquivo 1TUP.pdb.

Na figura 1, podem ser observadas 3 cópias da proteína p53 ligadas em diferentes posições a um trecho de DNA. A molécula de DNA está representada no modo *Trace 500*, sendo os nucleotídeos de adenina apresentados em azul (*blue*), os de citosina em violeta (*violet*), os de guanina em azul celeste (*skyblue*) e os de timina em magenta (*magenta*). As cópias da proteína p53 estão representadas no modo *Backbone 100* nas cores azul matiz (*bluetint*), verde (*green*) e verde matiz (*greentint*). No quadro 1, está o script desenvolvido.

Para mais informações sobre esta proteína, consulte o **Capítulo 1 – Proteína supressora de tumor p53** do e-book **Proteínas envolvidas em patologias - Volume 1**.

Figura 1 – Proteína supressora de tumor p53



Legenda de cores		
Estrutura	Cor	Amostra de cor
Adenina	Azul (<i>blue</i>)	
Citosina	Violeta (<i>violet</i>)	
Guanina	Azul celeste (<i>skyblue</i>)	
Timina	Magenta (<i>magenta</i>)	
1ª cópia da p53	Azul matiz (<i>bluetint</i>)	
2ª cópia da p53	Verde (<i>green</i>)	
3ª cópia da p53	Verde matiz (<i>greentint</i>)	

Quadro 1 – Script desenvolvido para a proteína supressora de tumor p53

```
load 1tup.pdb
select dna
wireframe off
trace 500
rotate z 65
select da
colour blue
select dc
colour violet
select dg
colour skyblue
select dt
colour magenta
select *a
backbone 100
colour bluetint
wireframe off
select *b
colour greentint
backbone 100
wireframe off
select *c
backbone 100
wireframe off
colour green
zoom 120
```

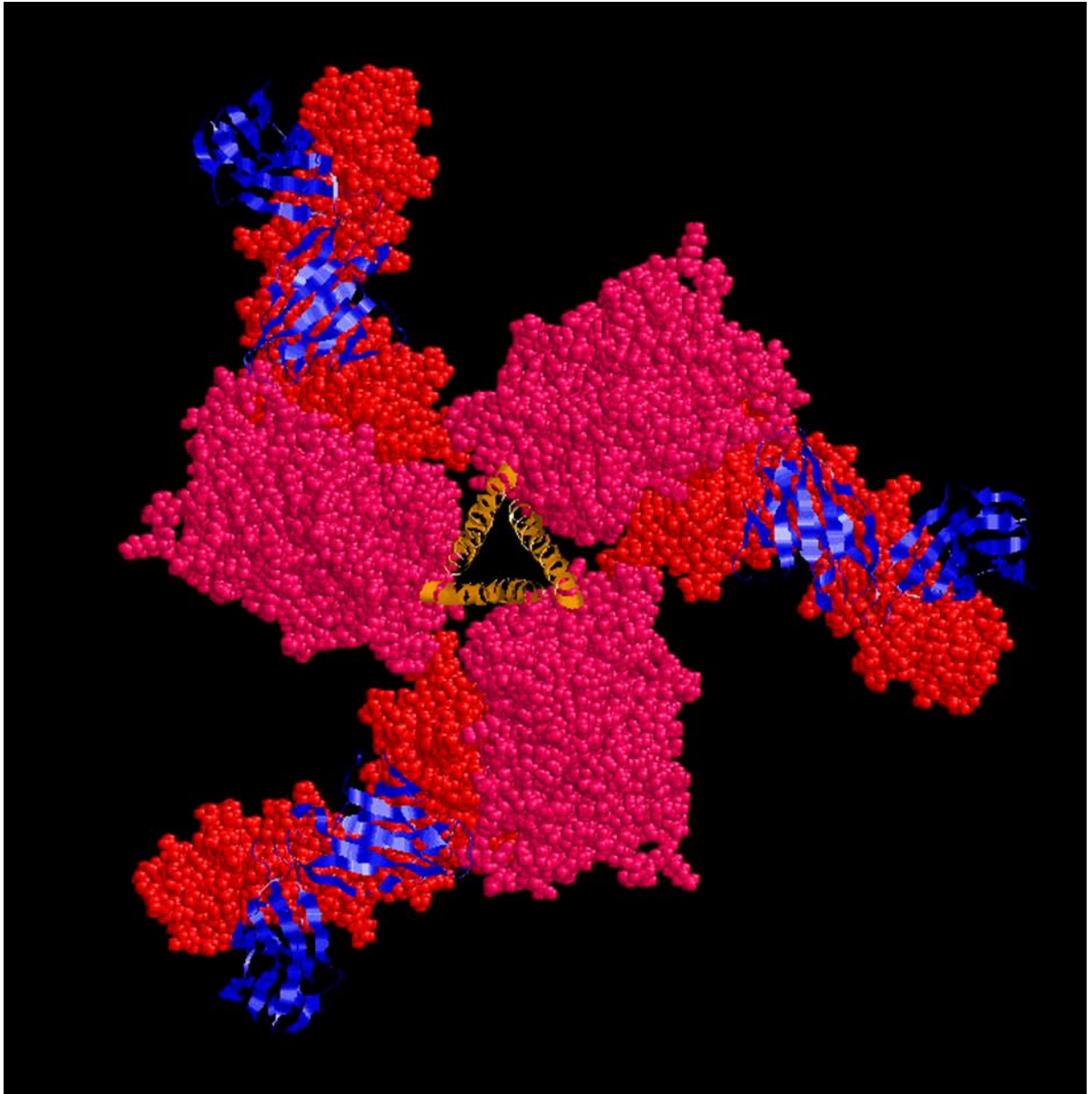
3 Glicoproteínas gp41 e gp120 do envelope do HIV-1




Para observação das glicoproteínas gp41 e gp120 do envelope do HIV-1 foi utilizado o arquivo 4CC8.pdb.

A figura 2 apresenta a glicoproteína gp41 no modo *Cartoons* em laranja (*orange*) e a glicoproteína gp120 no modo *Spacefill* em rosa quente (*hotpink*). Podem ser observadas também a ligação de cadeias leves do fragmento FAB do anticorpo VRC03 representada no modo *Spacefill* em vermelho (*red*) e cadeias pesadas do fragmento FAB do anticorpo VRC03 no modo *Cartoons* em azul (*blue*). No quadro 2, está o script desenvolvido para estas proteínas.

Para mais informações sobre estas proteínas, consulte o **Capítulo 3 – Glicoproteínas gp41 e gp120 do envelope do HIV-1** do e-book **Proteínas envolvidas em patologias - Volume 1**.

Figura 2 – Glicoproteínas gp41 e gp120 do envelope do HIV-1



Legenda de cores		
Estrutura	Cor	Amostra de cor
gp41	Laranja (<i>orange</i>)	
gp120	Rosa quente (<i>hotpink</i>)	
Cadeia leve do fragmento FAB do anticorpo VRC03	Vermelho (<i>red</i>)	
Cadeia pesada do fragmento FAB do anticorpo VRC03	Azul (<i>blue</i>)	

Quadro 2 – Script desenvolvido para as glicoproteínas gp41 e gp120 do envelope do HIV-1

```
load 4cc8.pdb
wireframe off
spacefill
select *a, *b, *c
spacefill off
cartoons
colour orange
select *d, *e, *g
colour hotpink
select *f, *h, *i
colour red
select *j, *k, *l
spacefill off
cartoons
colour blue
rotate z -47
translate x -5
translate y 2
zoom 130
```

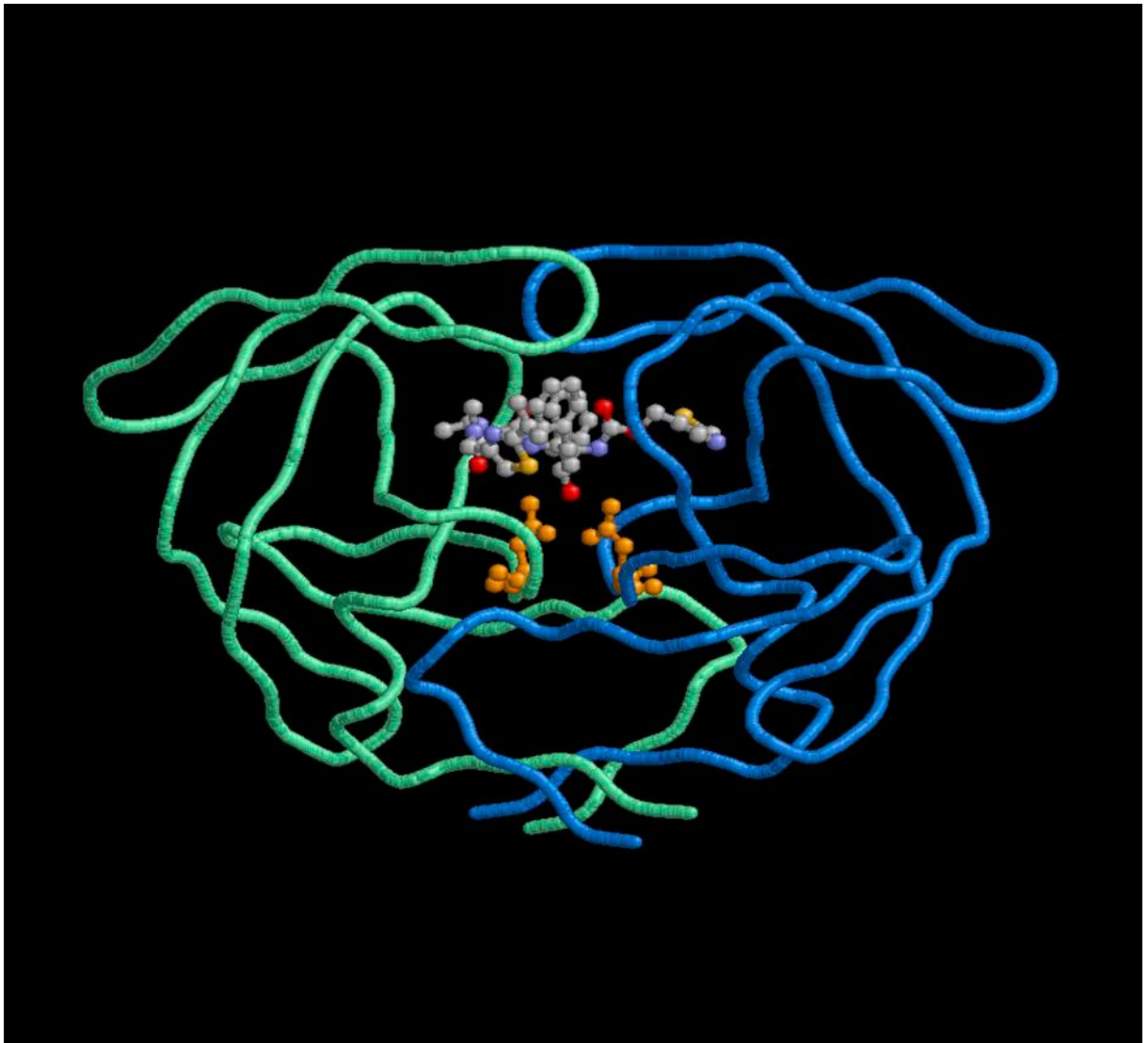
4 Protease do HIV-1

Para observação da protease do HIV-1 foi utilizado o arquivo 1HXW.pdb.



Na figura 3, observa-se que a protease do HIV-1 é formada por um dímero, cujas cadeias estão representadas no modo *Trace* 100 em verde matiz (*greentint*) e em azul celeste (*skyblue*). No centro da figura, observa-se o fármaco ritonavir, representado no modo *Spacefill* 125, *Wireframe* 50 e *Colour* CPK. Na interação entre o ritonavir e a protease do HIV-1, ocorre a importante participação do resíduo de aminoácido ácido aspártico 25, representado no modo *Spacefill* 125, *Wireframe* 50 e *Colour Gold*. No quadro 3, está o script desenvolvido.

Para mais informações sobre esta proteína, consulte o **Capítulo 4 – Protease do HIV-1** do e-book **Proteínas envolvidas em patologias - Volume 1**.

Figura 3 – Protease do HIV-1



Legenda de cores

Estrutura	Cor	Amostra de cor
Cadeia A	Verde matiz (<i>greentint</i>)	
Cadeia B	Azul celeste (<i>skyblue</i>)	
Átomo de carbono do ritonavir	Cinza claro (padrão CPK)	
Átomo de enxofre do ritonavir	Amarelo (padrão CPK)	
Átomo de nitrogênio do ritonavir	Azul celeste (padrão CPK)	
Átomo de oxigênio do ritonavir	Vermelho (padrão CPK)	
Resíduos de ácido aspártico 25 das cadeias A e B	Ouro (<i>gold</i>)	

Quadro 3 – Script desenvolvido para a protease do HIV-1

```
load 1hwx.pdb
select all
wireframe off
trace 100
select *a
colour greentint
select *b
colour skyblue
select rit
spacefill 125
wireframe 50
colour cpk
select asp25
spacefill 125
wireframe 50
colour gold
translate y -4
translate x 1
rotate y 50
rotate z 41
rotate x -10
zoom 200
```

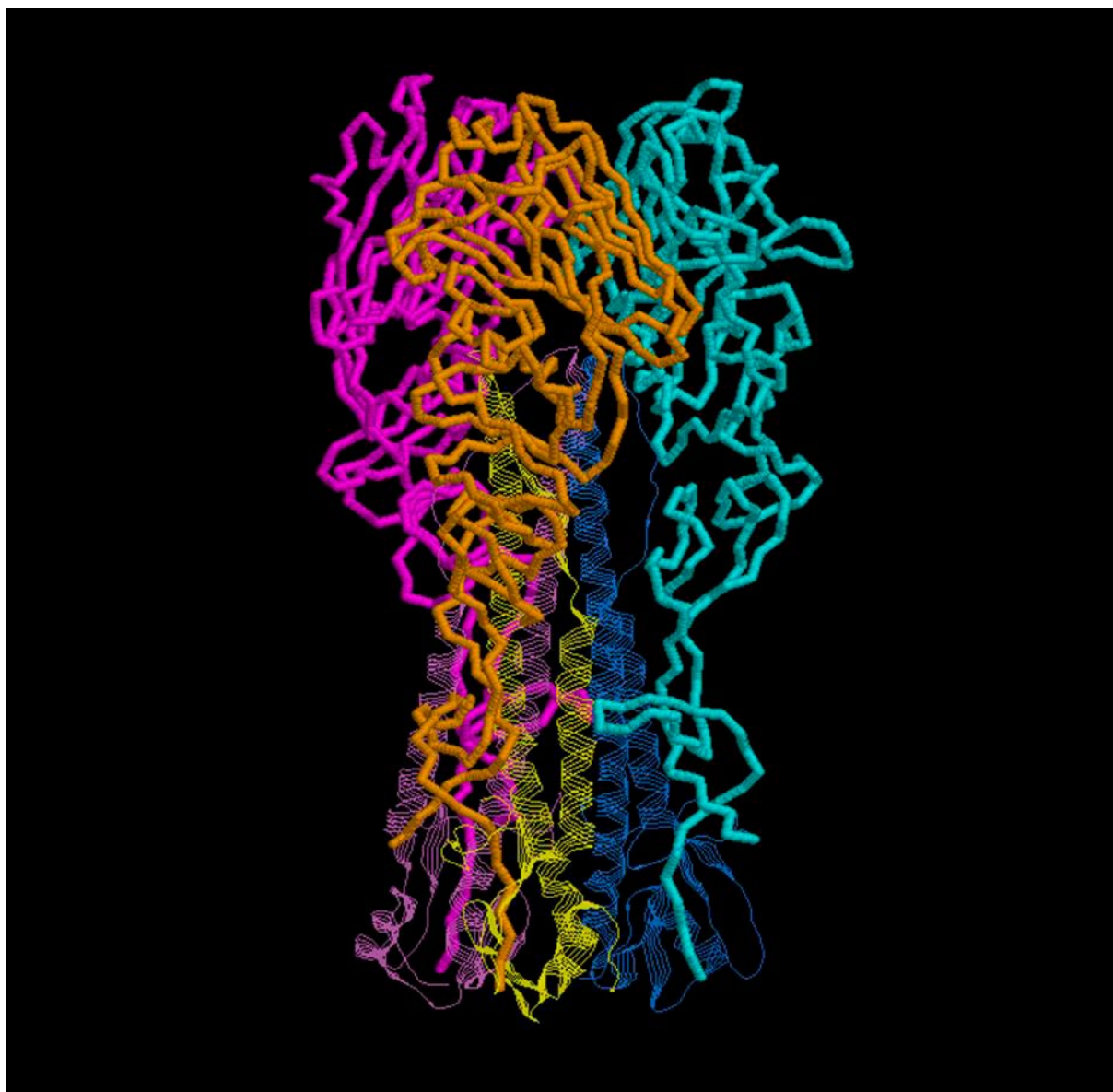

5 Hemaglutinina do vírus influenza H1 1918

Para observação da hemaglutinina do vírus influenza H1 1918 foi utilizado o arquivo 1RUZ.pdb.







Na figura 4, observa-se a cadeia HA1 do primeiro monômero representada no modo *Backbone* 150 em magenta (*magenta*), a cadeia HA2 do primeiro monômero no modo *Strands* em violeta (*violet*), a cadeia HA1 do segundo monômero no modo *Backbone* 150 em ciano (*cyan*), a cadeia HA2 do segundo monômero no modo *Strands* em azul celeste (*skyblue*), a cadeia HA1 do terceiro monômero no modo *Backbone* 150 em laranja (*orange*) e a cadeia HA2 do terceiro monômero no modo *Strands* em amarelo (*yellow*). No quadro 4, está o script desenvolvido.

Para mais informações sobre esta proteína, consulte o **Capítulo 5 – Hemaglutinina do vírus influenza H1 1918** do e-book **Proteínas envolvidas em patologias - Volume 1**.

Figura 4 – Hemaglutinina do vírus influenza H1 1918



Legenda de cores

Estrutura	Cor	Amostra de cor
Cadeia HA1 do primeiro monômero	Magenta (<i>magenta</i>)	
Cadeia HA2 do primeiro monômero	Violeta (<i>violet</i>)	
Cadeia HA1 do segundo monômero	Ciano (<i>cyan</i>)	
Cadeia HA2 do segundo monômero	Azul celeste (<i>skyblue</i>)	
Cadeia HA1 do terceiro monômero	Laranja (<i>orange</i>)	
Cadeia HA2 do terceiro monômero	Amarelo (<i>yellow</i>)	

Quadro 4 – Script desenvolvido para a hemaglutinina do vírus influenza H1 1918

```
load 1ruz.pdb
wireframe off
select *h
backbone 150
colour magenta
select *i
strands
colour violet
select *j
backbone 150
colour cyan
select *k
strands
colour skyblue
select *l
backbone 150
colour orange
select *m
strands
colour yellow
rotate z -35
rotate y 5
rotate x 45
zoom 105
```

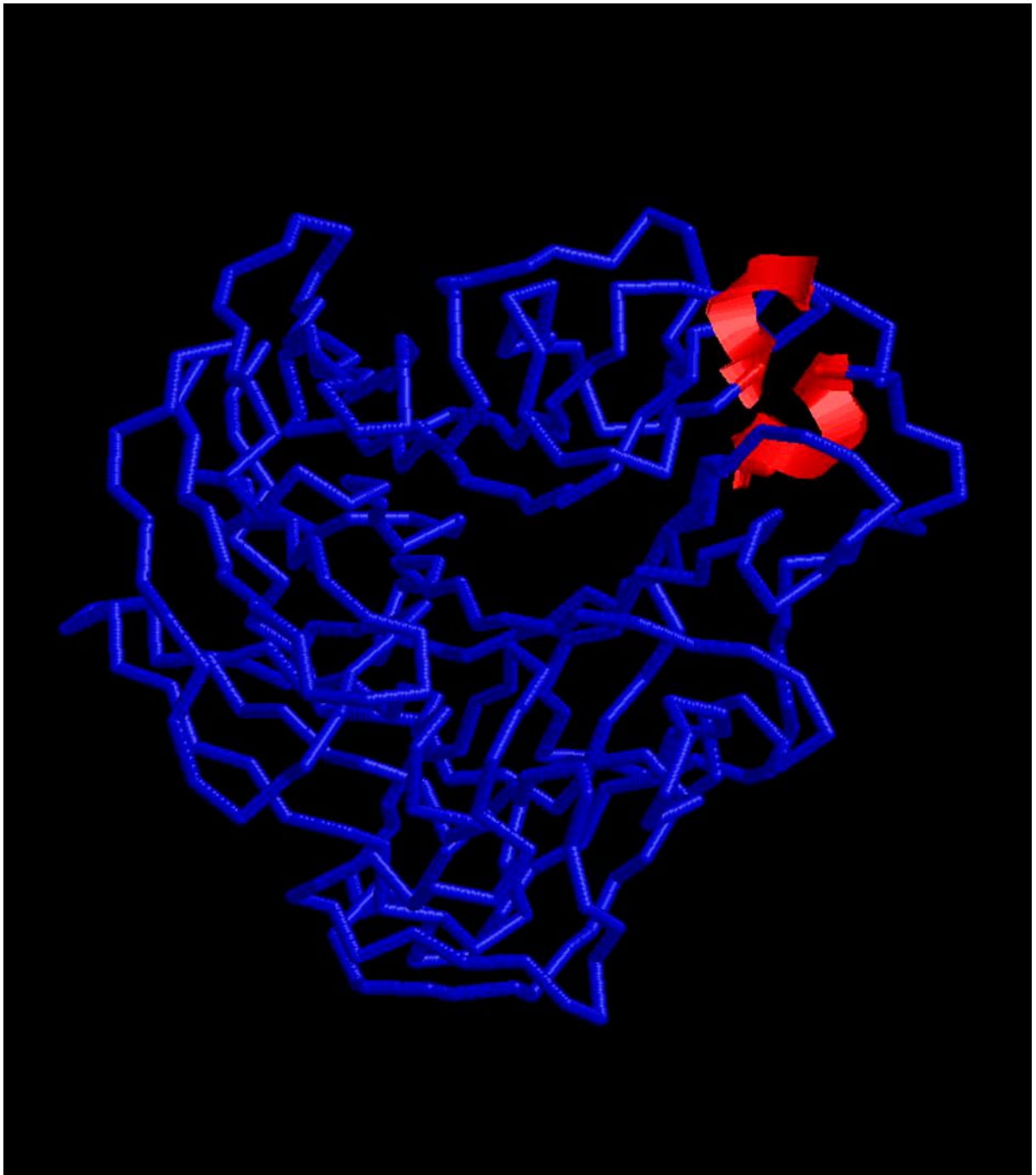
6 Neuraminidase do vírus influenza H2N2

Para observação da neuraminidase do vírus influenza H2N2 foi utilizado o arquivo 1NN2.pdb.



Na figura 5, observa-se duas pequenas alfa-hélices da neuraminidase no modo *Cartoons* em vermelho (*red*) e os demais resíduos no modo *Backbone 100* em azul (*blue*). No quadro 5, está o script desenvolvido.

Para mais informações sobre esta proteína, consulte o **Capítulo 6 – Neuraminidase do vírus influenza H2N2** do e-book **Proteínas envolvidas em patologias - Volume 1**.

Figura 5 – Neuraminidase do vírus influenza H2N2



Legenda de cores

Estrutura	Cor	Amostra de cor
Alfa-hélices	Vermelho (<i>red</i>)	
Demais resíduos	Azul (<i>blue</i>)	

Quadro 5 – Script desenvolvido para a neuraminidase do vírus influenza H2N2

```
load 1nn2.pdb
wireframe off
backbone 100
colour blue
select helix
backbone off
cartoons
colour red
rotate y -130
zoom 180
```

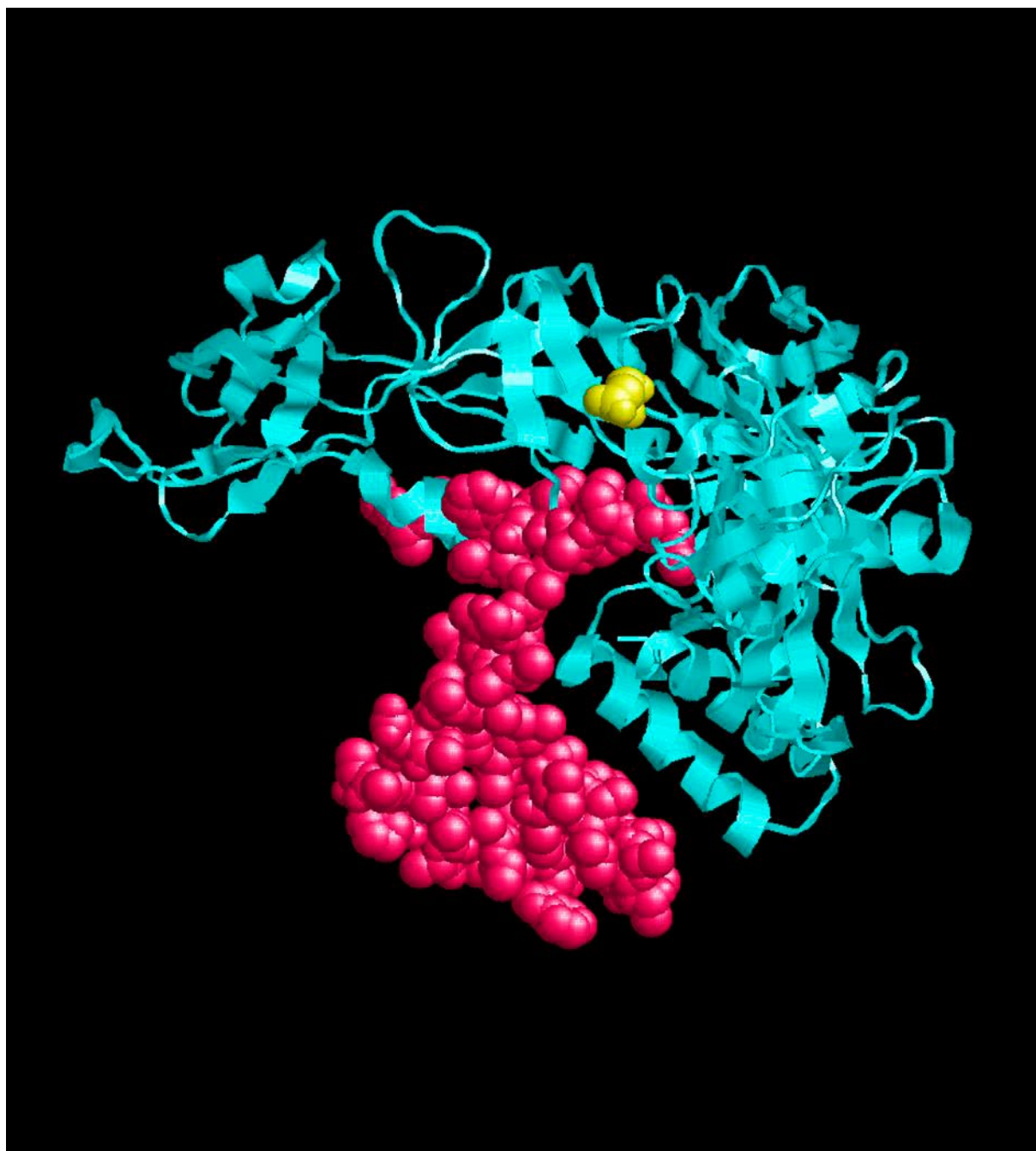
7 Proteínas E e M do vírus da Zika




Para observação das proteínas E e M do vírus da Zika foi utilizado o arquivo 5IRE.pdb.

Na figura 6, observa-se a proteína E representada no modo *Cartoons* em ciano (*cyan*) e a proteína M no modo *Spacefill* em rosa quente (*hotpink*). A asparagina 154, um importante resíduo que participa da ligação do vírus com a célula hospedeira, está representada no modo *Spacefill* em amarelo (*yellow*). No quadro 6, está o o script desenvolvido.

Para mais informações sobre estas proteínas, consulte o **Capítulo 8 – Proteínas E e M do vírus da Zika** do e-book **Proteínas envolvidas em patologias - Volume 1**.

Figura 6 – Proteínas E e M do vírus da Zika



Legenda de cores		
Estrutura	Cor	Amostra de cor
Proteína E	Ciano (<i>cyan</i>)	
Proteína M	Rosa quente (<i>hotpink</i>)	
Asparagina 154	Amarelo (<i>yellow</i>)	

Quadro 6 – Script desenvolvido para as proteínas E e M do vírus da Zika

```
load 5ire.pdb
wireframe off
select *a
cartoons
colour cyan
select *b
spacefill
colour hotpink
select asn154A
spacefill
colour yellow
rotate x -70
rotate y 60
translate y -11
zoom 270
```

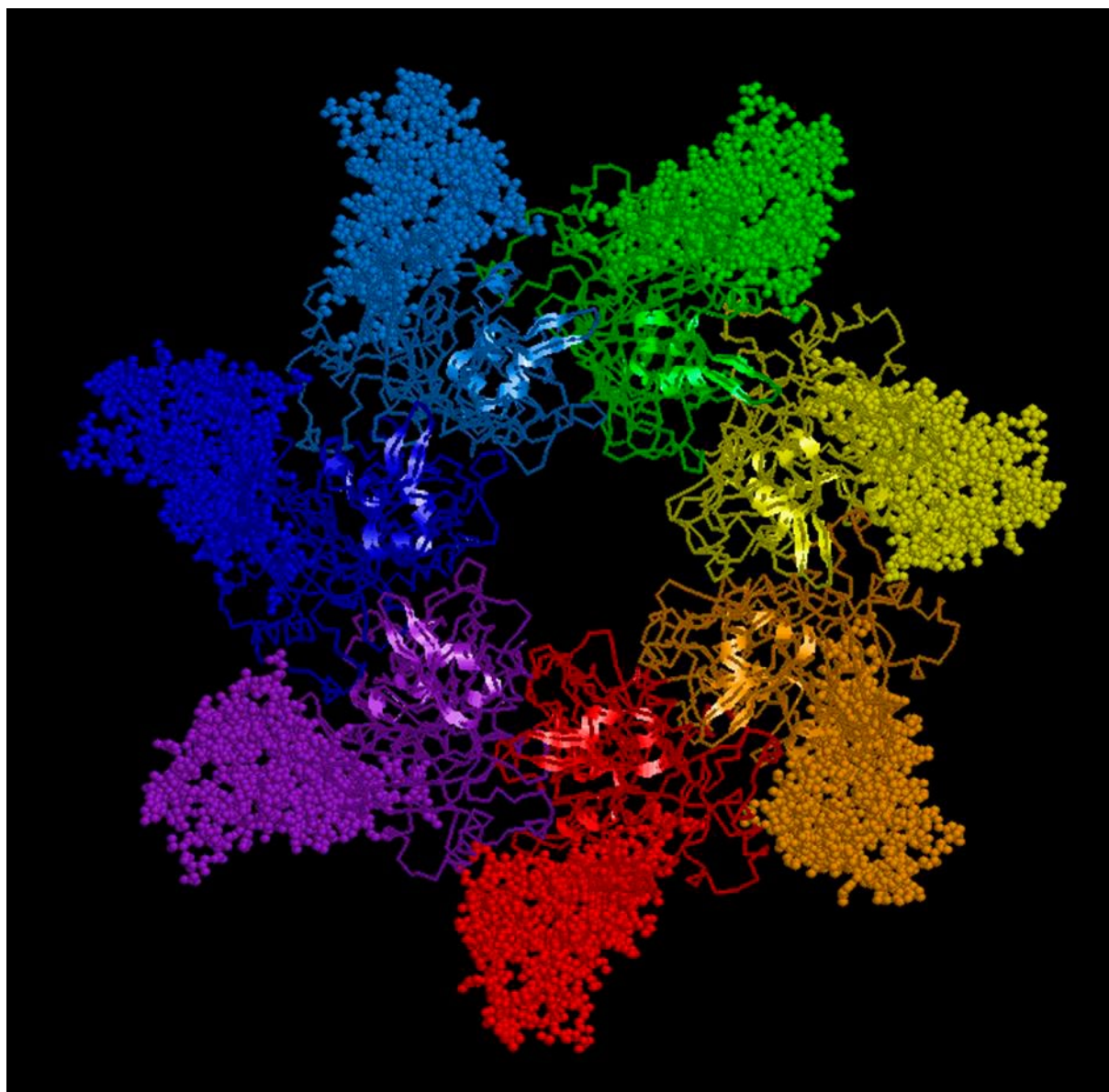
8 Antígeno protetor do antraz








Para observação do antígeno protetor do antraz foi utilizado o arquivo 1TZO.pdb.

Na figura 7, observa-se que cada cadeia do antígeno protetor do antraz, é formada por 4 domínios: o domínio 1 está representado no modo *Ribbons*, os domínios 2 e 3 no modo *Backbone* e o domínio 4 no modo *Spacefill 250*. Cada uma das 7 cadeias está representada em uma cor diferente: cadeia A em vermelho (*red*), cadeia B em laranja (*orange*), cadeia C em amarelo (*yellow*), cadeia D em verde (*green*), cadeia E em azul celeste (*skyblue*), cadeia F em azul (*blue*) e cadeia O em púrpura (*purple*). No quadro 7, está o script desenvolvido.

Para mais informações sobre esta proteína, consulte o **Capítulo 9 – Antígeno protetor do antraz** do e-book **Proteínas envolvidas em patologias - Volume 1**.

Figura 7 – Antígeno protetor do antraz



Legenda de cores		
Estrutura	Cor	Amostra de cor
Cadeia A	Vermelho (<i>red</i>)	
Cadeia B	Laranja (<i>orange</i>)	
Cadeia C	Amarelo (<i>yellow</i>)	
Cadeia D	Verde (<i>green</i>)	
Cadeia E	Azul celeste (<i>skyblue</i>)	
Cadeia F	Azul (<i>blue</i>)	
Cadeia O	Púrpura (<i>purple</i>)	

Quadro 7 – Script desenvolvido para o antígeno protetor do antraz

```
load 1tzo.pdb
wireframe off
select *a, *b, *c, *d, *e, *f, *o
backbone 40
select *a
color red
select *b
color orange
select *c
color yellow
select *d
color green
select *e
color skyblue
select *f
color blue
select *o
color purple
select 1-258
ribbons
select 596-735
spacefill 250
select *g, *h, *i, *j, *k, *l, *m
ribbons off
spacefill off
rotate y -71
rotate x 13
translate x 8
translate y 16
zoom 200
```

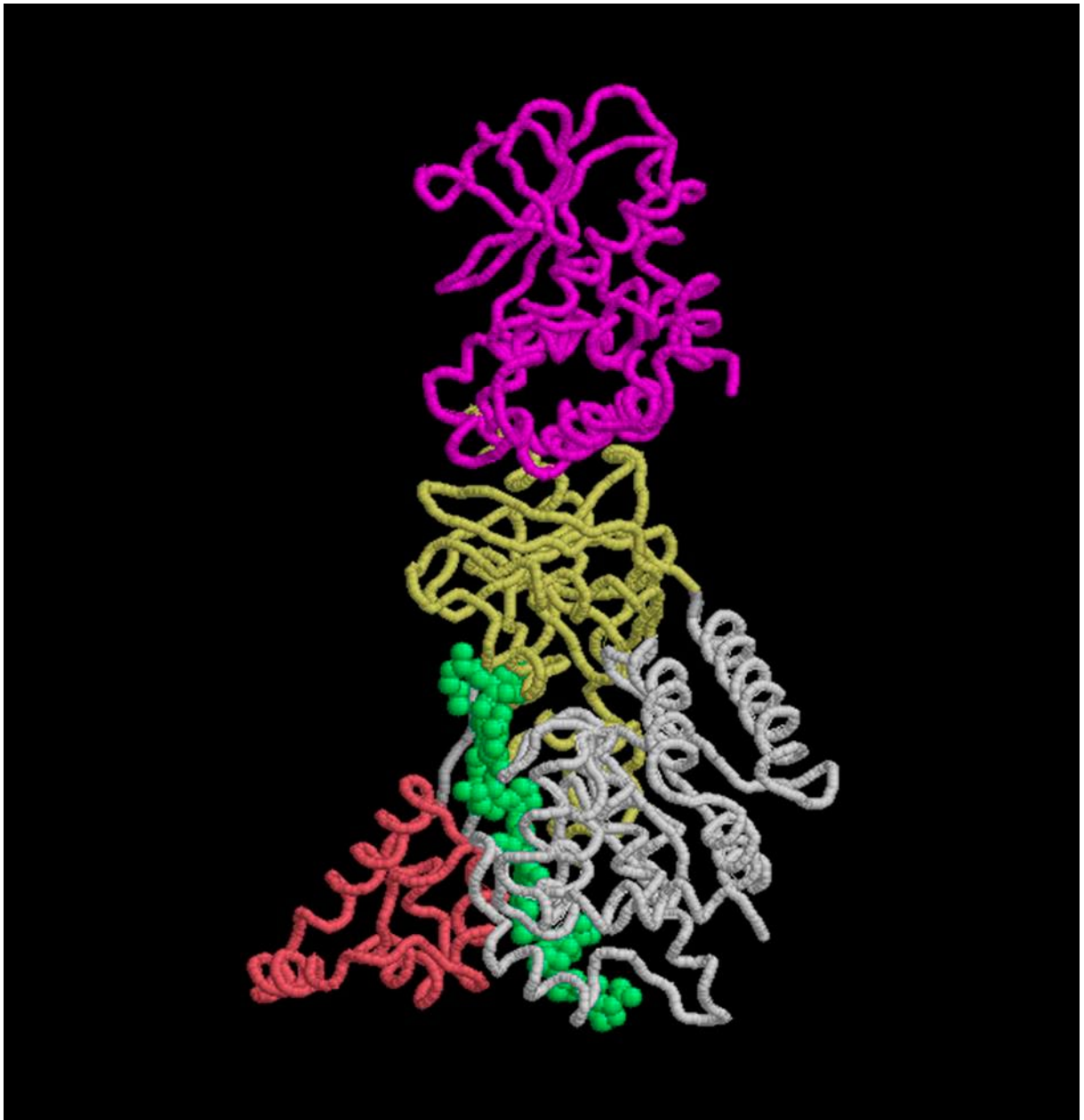
9 Fator letal do antraz






Para observação do fator letal do antraz foi utilizado o arquivo 1JKY.pdb.

Na figura 8, observa-se o fator letal do antraz composto por 4 domínios, representados no modo *Trace* 150: o domínio I está representado em magenta (*magenta*), o domínio II em amarelo matiz (*yellowtint*), o domínio III em rosa (*pink*) e o domínio IV em branco (*white*). Observa-se também a ligação do fator letal do antraz com uma proteína quinase ativada por mitógenos (MAPKK2), representada em verde mar (*seagreen*). No quadro 8, está o script desenvolvido.

Para mais informações sobre esta proteína, consulte o **Capítulo 10 – Fator letal do antraz** do e-book **Proteínas envolvidas em patologias - Volume 1**.

Figura 8 – Fator letal do antraz



Legenda de cores		
Estrutura	Cor	Amostra de cor
Domínio I	Magenta (<i>magenta</i>)	
Domínio II	Amarelo matiz (<i>yellowtint</i>)	
Domínio III	Rosa (<i>pink</i>)	
Domínio IV	Branco (<i>white</i>)	
MAPKK2	Verde mar (<i>seagreen</i>)	

Quadro 8 – Script desenvolvido para o fator letal do antraz

```
load 1jky.pdb
wireframe off
backbone
trace 150
select 1-16
spacefill 300
colour seagreen
select 29-262
colour magenta
select 263-297
colour yellowtint
select 385-550
colour yellowtint
select 303-382
colour pink
select 552-776
colour white
rotate z 110
zoom 97
```

10 DD-peptidase do *Streptomyces* sp. R61









Para observação da DD-peptidase do *Streptomyces* sp. R61 foi utilizado o arquivo 1HVB.pdb.

Na figura 9, observa-se a DD-peptidase representada no modo *Ribbons* em branco (*white*), destacando-se as alfa-hélices em verde (*green*) e as fitas beta em verde matiz (*greentint*). Nesta figura, é apresentada também a cefalosporina, um inibidor desta enzima bacteriana, representada nos modos *Wireframe 70*, *Spacefill 150* e *Colour CPK*. No quadro 9, está o script desenvolvido.

Para mais informações sobre esta proteína, consulte o **Capítulo 13 - DD-Peptidase do *Streptomyces* sp. R61** do e-book **Proteínas envolvidas em patologias - Volume 1**.

Figura 9 – DD-peptidase do *Streptomyces* sp. R61


Legenda de cores

Estrutura	Cor	Amostra de cor
Alfa-hélices da DD-peptidase	Verde (<i>green</i>)	
Fitas beta da DD-peptidase	Verde matiz (<i>greentint</i>)	
Demais resíduos da DD-peptidase	Branco (<i>white</i>)	
Átomo de carbono da cefalosporina	Cinza claro (padrão CPK)	
Átomo de oxigênio da cefalosporina	Vermelho (padrão CPK)	
Átomo de nitrogênio da cefalosporina	Azul celeste (padrão CPK)	
Átomo de enxofre da cefalosporina	Amarelo (padrão CPK)	
Ligação química entre átomos da cefalosporina	Ciano (padrão CPK)	

Quadro 9 – Script desenvolvido para a DD-peptidase do *Streptomyces* sp. R61

```
load 1hvb.pdb
wireframe off
ribbons
colour white
select helix
colour green
select sheet
colour greentint
select CEH
wireframe 70
spacefill 150
colour cpk
rotate x 50
rotate z 160
rotate y 15
translate y -2
zoom 165
```

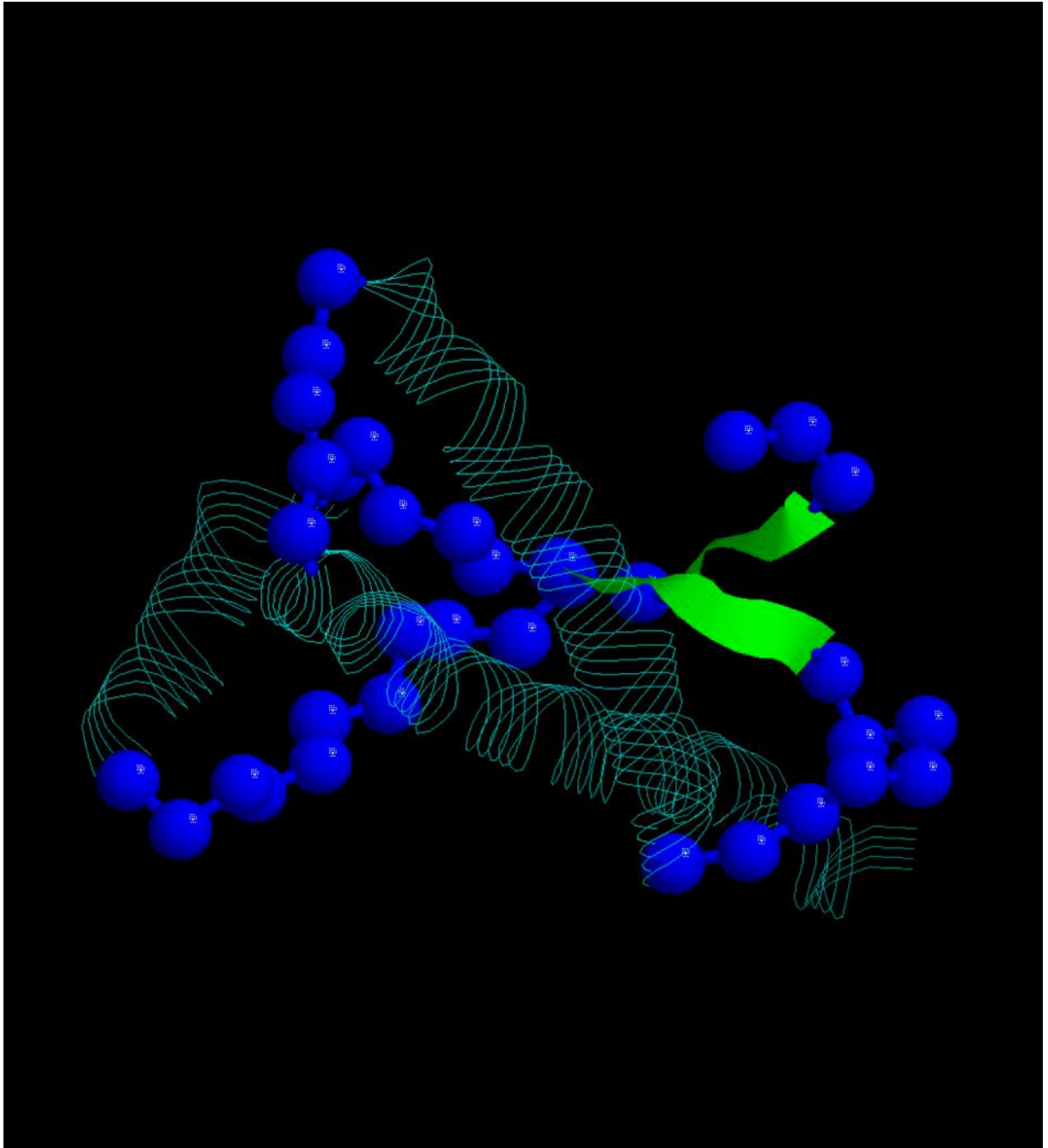
11 Fragmento 121-230 da proteína priônica celular humana




Para observação do fragmento 121-230 da proteína priônica celular humana foi utilizado o arquivo 1QM2.pdb.

A figura 10 apresenta os carbonos alfa visualizados nos modos *Spacefill* e *Specpower* 100 em azul (*blue*). A estrutura secundária deste fragmento está representada pelas alfa-hélices no modo *Strands* em ciano (*cyan*) e fitas beta no modo *Ribbons* em verde (*green*). No quadro 10, está o script desenvolvido.

Para mais informações sobre esta proteína, consulte o **Capítulo 1 – Fragmento 121-230 da proteína priônica celular humana** do e-book **Proteínas envolvidas em patologias - Volume 2**.

Figura 10 – Fragmento 121-230 da proteína priônica celular humana



Legenda de cores		
Estrutura	Cor	Amostra de cor
Carbonos alfa	Azul (<i>blue</i>)	
Alfa-hélices	Ciano (<i>cyan</i>)	
Fitas beta	Verde (<i>green</i>)	

Quadro 10 – Script desenvolvido para o fragmento 121-230 da proteína priônica celular humana

```
load 1qm2.pdb
wireframe off
trace
select *.CA
spacefill
colour blue
set specpower 100
select helix
spacefill off
strands
colour cyan
select sheets
spacefill off
ribbons
colour green
rotate x 30
translate y 4
zoom 180
```

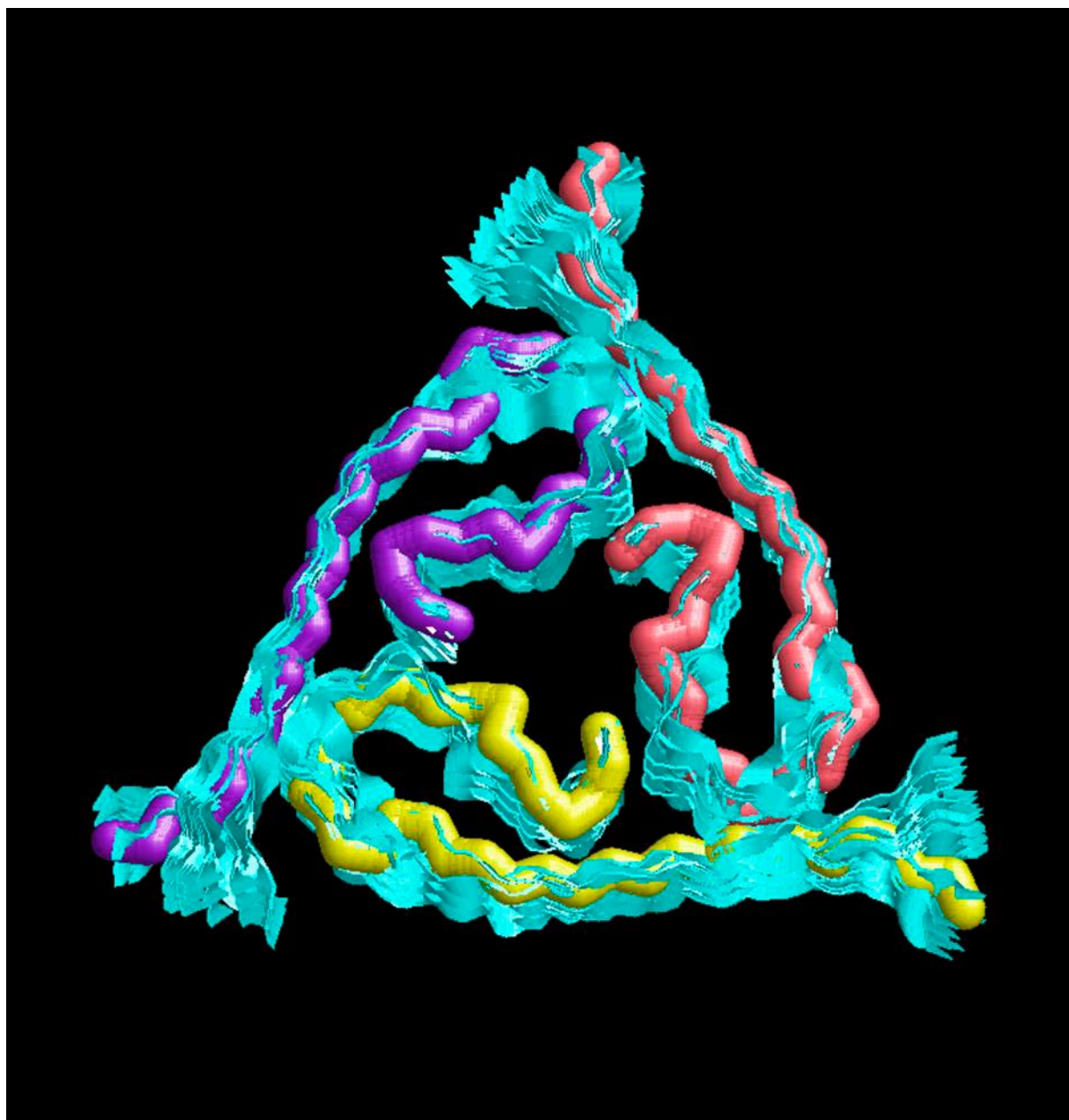
12 Fibrila beta-amiloide

Para observação da fibrila beta-amiloide foi utilizado o arquivo 2M4J.pdb.





Na figura 11, observa-se um primeiro trio de proteínas beta-amiloides no modo *Backbone* 500: o modelo 1 da cadeia A em rosa (*pink*), o modelo 1 da cadeia B em amarelo (*yellow*) e o modelo 1 da cadeia C em púrpura (*purple*). Este primeiro trio une-se a vários outros trios de fibrilas beta-amiloides que estão representadas no modo *Cartoons* 500 em ciano (*cyan*). No quadro 11, está o script desenvolvido.

Para mais informações sobre esta proteína, consulte o **Capítulo 2 - Fibrila beta-amiloide** do e-book **Proteínas envolvidas em patologias - Volume 2**.

Figura 11 – Fibrila beta-amiloide



Legenda de cores

Estrutura	Cor	Amostra de cor
Modelo 1 da cadeia A	Rosa (<i>pink</i>)	
Modelo 1 da cadeia B	Amarelo (<i>yellow</i>)	
Modelo 1 da cadeia C	Púrpura (<i>purple</i>)	
Demais modelos das fibrilas beta-amiloides	Ciano (<i>cyan</i>)	

Quadro 11 – Script desenvolvido para a fibrila beta-amiloide

```
load 2m4j.pdb
cartoons 500
colour cyan
wireframe off
select *a/1
colour pink
backbone 500
select *b/1
colour yellow
backbone 500
select *c/1
colour purple
backbone 500
rotate x -12
rotate z 13
translate y 2
zoom 130
```

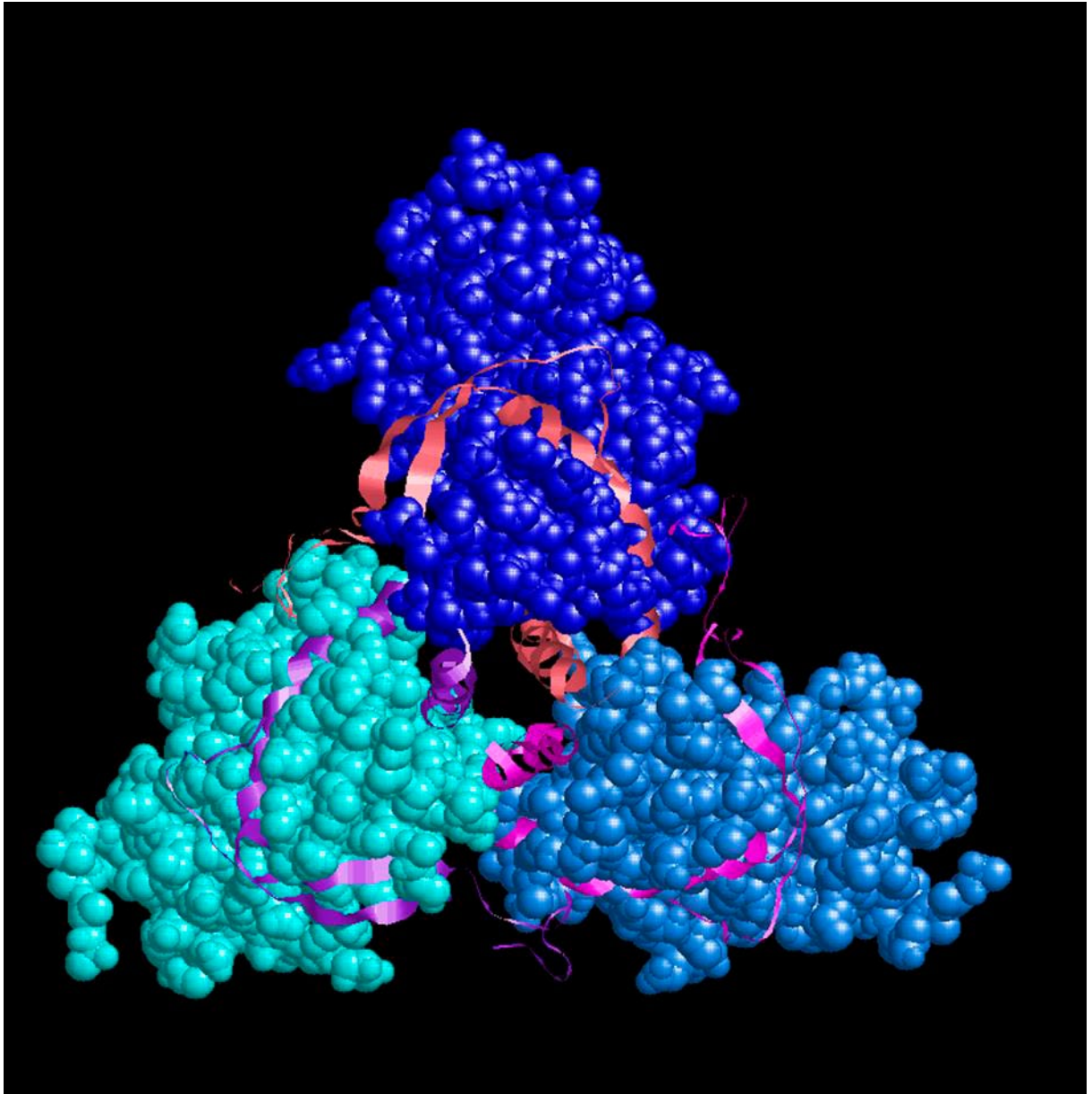

13 Glicoproteínas GP1 e GP2 do envelope do vírus Ebola


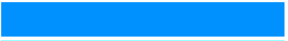




Para observação das glicoproteínas GP1 e GP2 do envelope do vírus Ebola foi utilizado o arquivo 3CSY.pdb.

A figura 12 apresenta uma estrutura trimérica das GP1 e GP2 do vírus Ebola. Três proteínas GP1 estão representadas no modo *Spacefill* em azul (*blue*), azul celeste (*skyblue*) e ciano (*cyan*). As três proteínas GP2 estão representados no modo *Ribbons* em rosa (*pink*), magenta (*magenta*) e púrpura (*purple*). No quadro 12, está o script desenvolvido.

Para mais informações sobre estas proteínas, consulte o **Capítulo 3 – Glicoproteínas GP1 e GP2 do envelope do vírus Ebola** do e-book **Proteínas envolvidas em patologias - Volume 2**.

Figura 12 – Glicoproteínas GP1 e GP2 do envelope do vírus Ebola



Legenda de cores		
Estrutura	Cor	Amostra de cor
Modelo 1 da proteína GP1	Azul (<i>blue</i>)	
Modelo 2 da proteína GP1	Azul celeste (<i>skyblue</i>)	
Modelo 3 da proteína GP1	Ciano (<i>cyan</i>)	
Modelo 1 da proteína GP2	Rosa (<i>pink</i>)	
Modelo 2 da proteína GP2	Magenta (<i>magenta</i>)	
Modelo 3 da proteína GP2	Púrpura (<i>purple</i>)	

Quadro 12 – Script desenvolvido para as glicoproteínas GP1 e GP2 do envelope do vírus Ebola

```
load 3csy.pdb
wireframe off
select *i
spacefill
colour blue
select *k
spacefill
colour skyblue
select *m
spacefill
colour cyan
select *j
ribbons
colour pink
select *l
ribbons
colour magenta
select *n
ribbons
colour purple
rotate x 105
rotate y 180
rotate z -9
translate y 8
zoom 260
```

14 Proteína p24 do capsídeo do HIV-1

Para observação da proteína p24 do capsídeo do HIV-1 foi utilizado o arquivo 3MGE.pdb.

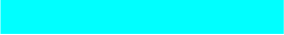

Na figura 13, é possível observar que a proteína p24 do capsídeo do HIV-1 é classificada como toda alfa, pois apresenta apenas alfa-hélices em sua estrutura secundária. As alfa-hélices são exibidas em ciano (*cyan*) e os demais resíduos em branco (*white*). No quadro 13, está o script desenvolvido.

Para mais informações sobre esta proteína, consulte o **Capítulo 5 - Proteína p24 do capsídeo do HIV-1** do e-book **Proteínas envolvidas em patologias - Volume 2**.

Figura 13 – Proteína p24 do capsídeo do HIV-1



Legenda de cores

Estrutura	Cor	Amostra de cor
Alfa-hélices	Ciano (<i>cyan</i>)	
Demais resíduos	Branco (<i>white</i>)	

Quadro 13 – Script desenvolvido para a proteína p24 do capsídeo do HIV-1

```
load 3mge.pdb
wireframe off
cartoons
select helix
colour cyan
rotate x 40
rotate y -30
translate y-2
zoom 115
```

15 Proteína E do envelope do vírus da dengue

Para observação da proteína E do envelope do vírus da dengue foi utilizado o arquivo 1K4R.pdb.

A figura 14 apresenta três cópias da proteína E do envelope do vírus da dengue no modo *Riboons*, a primeira cópia em verde (*green*), a segunda em vermelho (*red*) e a terceira em azul (*blue*). As alfa-hélices das três cópias são exibidas em amarelo (*yellow*). Observa-se também que cada cópia possui 12 resíduos de cisteína (representados no modo *Spacefill* em branco (*white*), que formam duplas unidas por pontes dissulfeto. No quadro 14, está o script desenvolvido.

Para mais informações sobre esta proteína, consulte o **Capítulo 6 – Proteína E do envelope do vírus da dengue** do e-book **Proteínas envolvidas em patologias - Volume 2**.

Figura 14 – Proteína E do envelope do vírus da dengue



Legenda de cores		
Estrutura	Cor	Amostra de cor
Primeira cópia da proteína E	Verde (<i>green</i>)	
Segunda cópia da proteína E	Vermelho (<i>red</i>)	
Terceira cópia da proteína E	Azul (<i>blue</i>)	
Alfa-hélices	Amarelo (<i>yellow</i>)	
Resíduos de cisteína	Branco (<i>white</i>)	

Quadro 14 – Script desenvolvido para a proteína E do envelope do vírus da dengue

```
load 1k4r.pdb
wireframe off
ribbons
select *a
colour green
select *b
colour red
select *c
colour blue
select helix
colour yellow
select cys
colour white
spacefill
zoom 200
```

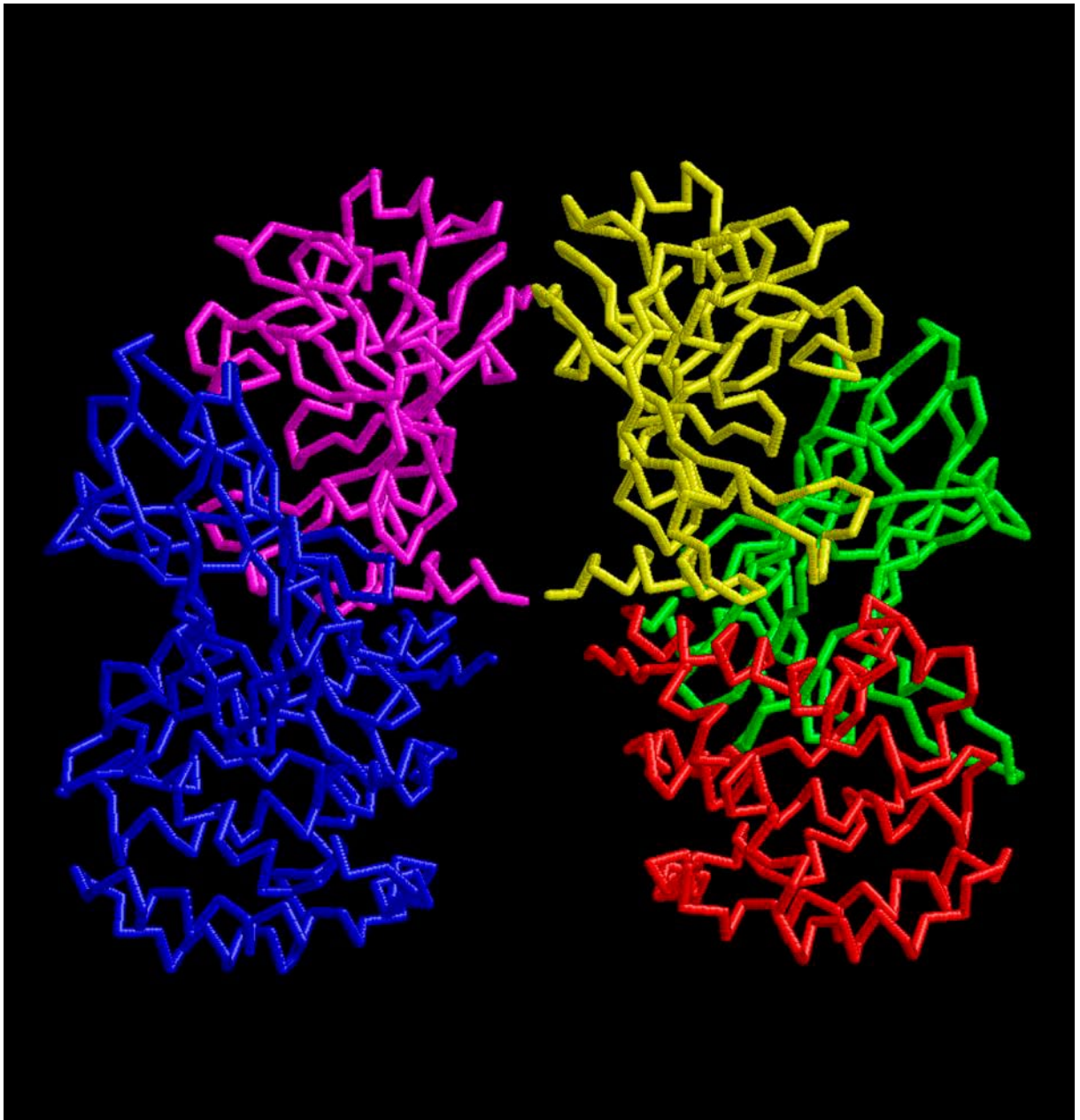
16 Toxina diftérica






Para observação da toxina diftérica foi utilizado o arquivo 1MDT.pdb.

Na figura 15, observa-se a estrutura dimérica da toxina diftérica representada no modo *Backbone* 100. A subunidade à esquerda representa o fragmento A em magenta (*magenta*) e o fragmento B em azul (*blue*). A subunidade à direita representa uma outra subunidade, porém representando os domínios: domínio C ou catalítico em amarelo (*yellow*), domínio R ou fixador da toxina ao receptor celular em verde (*green*) e o domínio T ou transmembrana em vermelho (*red*). No quadro 15, está o script desenvolvido.

Para mais informações sobre esta proteína, consulte o **Capítulo 7 - Toxina diftérica** do e-book **Proteínas envolvidas em patologias - Volume 2**.

Figura 15 – Toxina diftérica



Legenda de cores		
Estrutura	Cor	Amostra de cor
Fragmento A	Magenta (<i>magenta</i>)	
Fragmento B	Azul (<i>blue</i>)	
Domínio C	Amarelo (<i>yellow</i>)	
Domínio R	Verde (<i>green</i>)	
Domínio T	Vermelho (<i>red</i>)	

Quadro 15 – Script desenvolvido para a toxina diftérica

```
load 1mdt.pdb
wireframe off
backbone 100
select 1-190a
colour magenta
select 191-535a
colour blue
select 1-190b
colour yellow
select 191-378b
colour red
select 379-535b
colour green
rotate y 190
zoom 160
```

Este livro é uma sequência dos e-books intitulados **Proteínas envolvidas com Patologias – Volume 1 e Volume 2**, publicados pela Canal 6 Editora. Neste terceiro volume, os autores de cada capítulo recriaram os scripts apresentados nos volumes 1 e 2, obtendo novas imagens que apresentam em detalhes as estruturas bioquímicas de diferentes proteínas. Esta obra foi resultado das atividades desenvolvidas por alunos do 2º ano do Curso de Biomedicina que foram apresentadas na XII EXPOLAB – Exposição do Laboratório Escola de Biomedicina, promovido pelo Curso de Biomedicina da Universidade Paulista – UNIP, campus Bauru.

