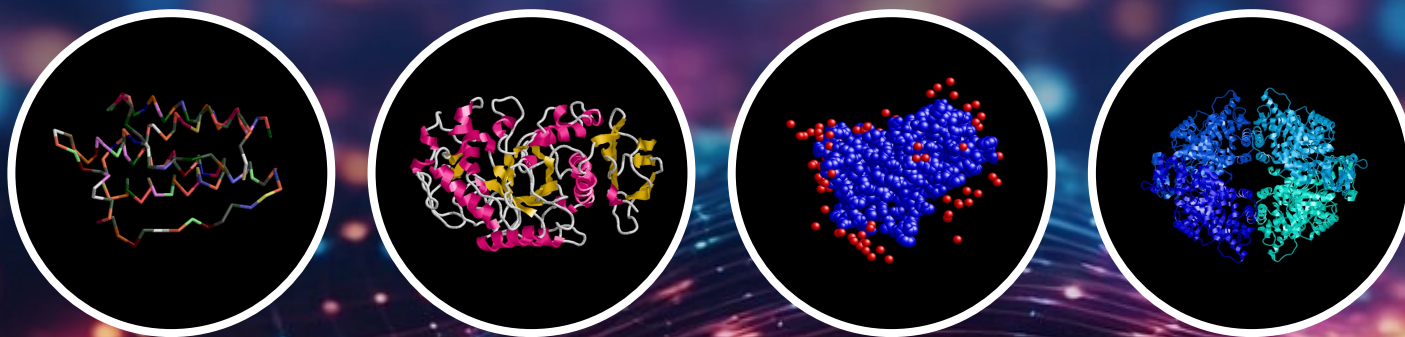


PROTEÍNAS

ILUSTRAÇÕES DE NÍVEIS ESTRUTURAIS

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



PROTEÍNAS

ILUSTRAÇÕES DE NÍVEIS ESTRUTURAIS

Prof. Dr. Renato Massaharu Hassunuma
*Professor Titular do Curso de Biomedicina da
Universidade Paulista – UNIP, Câmpus Bauru*

Prof.^a Dr.^a Patrícia Carvalho Garcia
*Coordenadora Auxiliar do Curso de Biomedicina da
Universidade Paulista – UNIP, Câmpus Bauru*

Prof.^a Dr.^a Sandra Heloísa Nunes Messias
*Coordenadora Geral do Curso de Biomedicina da
Universidade Paulista – UNIP*

1ª Edição / 2024
Bauru, SP

© Renato Massaharu Hassunuma.

Conselho Editorial

PROF.^a DR.^a ANA LAURA SENEDA
Doutora em Cirurgia e Medicina Translacional pela Universidade Estadual Paulista “Júlio de Mesquita Filho” – UNESP/Botucatu.

PROF.^a DR.^a TALITA MENDES OLIVEIRA VENTURA
Doutora em Ciências pela Universidade de São Paulo – USP/Bauru.

Capa e Design

PROF. DR. RENATO MASSAHARU HASSUNUMA

Catálogo na Publicação (CIP)
(BENITEZ Catálogo Ass. Editorial, MS, Brasil)

P96
1.ed. Proteínas: ilustrações de níveis estruturais [livro eletrônico] /
organizadores Renato Massaharu Hassunuma, Patrícia Carvalho
Garcia, Sandra Heloísa Nunes Messias. – 1. ed. – Bauru, SP : Canal 6
Editora, 2024.
PDF.

Bibliografia.
ISBN 978-85-7917-648-7
DOI 10.52050/9788579176487

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

03-2024/66 CDD 572.07

Índice para catálogo sistemático:
1. Proteínas : Estruturas : Bioquímica 572.07

Bibliotecária : Aline Graziele Benitez CRB-1/3129

Apresentação

Este livro é resultado das atividades práticas desenvolvidas por alunos do 2º ano na Disciplina de Bioquímica Estrutural do Curso de Biomedicina da Universidade Paulista – UNIP / Câmpus Bauru, durante o primeiro semestre de 2024. Em cada capítulo é apresentada uma proteína, seu código PDB, sua função, algumas informações sobre a imagem e as referências utilizadas.

Agradecemos a Prof.^a Dr.^a Ana Laura Seneda e a Prof.^a Dr.^a Talita Mendes Oliveira Ventura, membros do Conselho Editorial, por suas valiosas considerações na revisão desta publicação.

*Prof. Dr. Renato Massaharu Hassunuma,
Prof.^a Dr.^a Patrícia Carvalho Garcia e
Prof.^a Dr.^a Sandra Heloísa Nunes Messias.*

Sumário

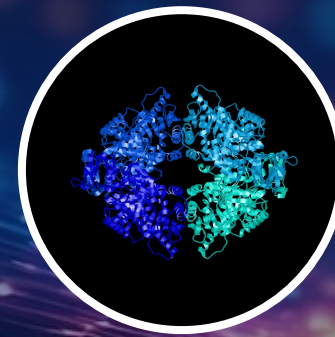
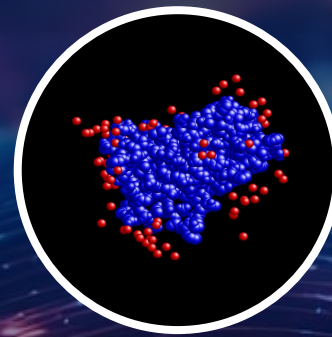
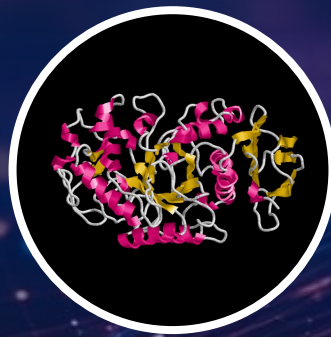
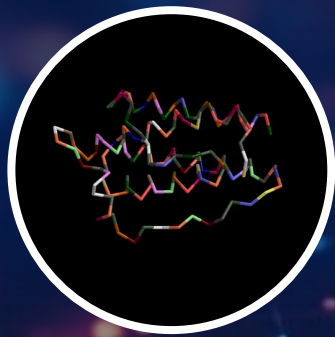
Parte I – Estrutura primária de proteínas	09
Estrutura primária do colágeno III humano (8HHK) (Yan, Zhang, Qin, 2022)	10
<i>Lucieli Cristina Aires Bitencourt</i>	
Estrutura primária da leptina humana (1AX8) (Zhang, Beals, Briggs, Clawson, Wery, Schewitz, 1997)	11
<i>Victoria Helena do Amaral</i>	
Estrutura primária monomérica da ferritina humana (1FHA) (Artymiuk, Harrison, 1990)	12
<i>Loraine Maciel Theodoro</i>	
Estrutura primária do interferon beta humano (1AU1) (Karpusas, Nolte, Lipscomb, 1997)	13
<i>Maria Fernanda de Souza Basseto</i>	
Estrutura primária da topoisomerase e do DNA humano (1A36) (Stewart, Redinbo, Qiu, Champoux, Hol, 1998)	14
<i>Julia de Oliveira Lima</i>	
Parte II – Estrutura secundária de proteínas	15
Estrutura secundária da aquaporina 1 humana (1H6I) (De Groot, Engel, Grubmuller, 2001)	16
<i>Gabriela Silva Guimarães</i>	
Estrutura secundária do receptor de vitamina D humano (1J78) (Verboven, Rabijns, De Maeyer, Van Baelen, Bouillon, De Ranter, 2001)	17
<i>Livia Dos Santos Massa</i>	

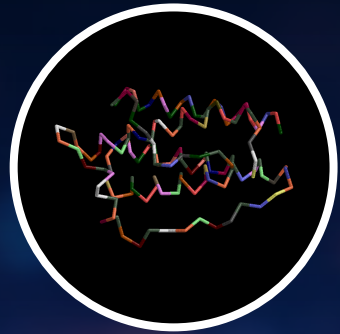
Estrutura secundária do domínio SH ₃ da espectrina humana (5FW9) (Gallego, Navarro, Ventura, Reverter, 2016)	18
<i>Vitor Soares Lobo</i>	
Estrutura secundária da amilase salivar humana (1SMD) (Ramasubbu, 1996)	19
<i>Renato Massaharu Hassunuma</i>	
Estrutura secundária da DNA polimerase e do DNA humano (1ZQA) (Pelletir, Sawaya, 1996)	20
<i>Wellington da Silva Vilela</i>	
Estrutura secundária da molécula transportadora de glicose 1 humana GLUT1 (4PYP) (Deng, Yan, Xu, Wu, Sun, Hu, Yan, 2014)	21
<i>Julia Varavallo Ferrareze</i>	
Parte III – Estrutura terciária de proteínas	22
Estrutura terciária do colágeno tipo II (6JEC) (Yang, Zhu, Ye, Zhang, 2019)	23
<i>Ana Paula Moreira</i>	
Estrutura terciária do hormônio de crescimento humano (1HGU) (Chantalat, Jones, Korber, Navaza, Pavlovsky, 1995)	24
<i>Joslayne Pereira Veras</i>	
Estrutura terciária da albumina sérica humana (1E7I) (Bhattacharya, Gruene, Curry, 2000)	25
<i>Thais Fernanda Barbosa Deák</i>	

Estrutura terciária da lisozima humana (1RE2) (Muraki, Harata, Sugita, Sato, 1999)	26
<i>Victor Cotrim Caramello</i>	
Parte IV – Estrutura quaternária de proteínas	27
Estrutura quaternária da caspase-1 humana (1ICE) (Wilson, Griffith, Kim, Navia, 1994)	28
<i>Isabelly Villa Guerra</i>	
Estrutura quaternária da glutathione transferase P1-1 humana (3GSS) (Oakley, Rossjohn, Parker, 1996)	29
<i>Karyna Paulino Bernardo</i>	
Estrutura quaternária da hemoglobina A humana (1BZ0) (Kavanaugh, Arnone, 1998)	30
<i>Milena Roberto Barbiero</i>	
Estrutura quaternária da piruvato quinase humana (4FXF) (Walkinshaw, Morgan, 2012)	31
<i>Amanda Lays dos Santos Silva</i>	
Créditos das figuras	32
Referências e sugestões de leitura	33

PROTEÍNAS

ILUSTRAÇÕES DE NÍVEIS ESTRUTURAIS





PARTE I:

ESTRUTURA PRIMÁRIA DE PROTEÍNAS

A estrutura primária de uma proteína corresponde à sua sequência de resíduos de aminoácidos, os quais são unidos por ligações peptídicas (Hassunuma, Garcia, Messias, 2018).

Estrutura primária do colágeno III humano (8HHK) (Yan, Zhang, Qin, 2022)

O colágeno humano é uma molécula presente na matriz extracelular que possui conformação de tripla hélice (Goodsell, 2000). A ilustração ao lado foi desenvolvida utilizando os comandos *wireframe off*, *trace 500* e *colours shapely* para mostrar a estrutura primária da proteína. Cada tipo de aminoácido é identificado por uma cor diferente. Observe a grande quantidade de resíduos de glicina, representados em branco.

Referências:

Goodsell D. Molecule of the month: collagen. 2000 Apr [acesso 02 mar 2024]. Disponível em: <https://pdb101.rcsb.org/motm/4>.

Yan ZC, Zhang D, Qin B. Crystal structure of a triple-helix region of human collagen type III. 2022 Nov 16 [acesso 24 fev 2024]. Disponível em: <https://www.rcsb.org/structure/8HHK>.



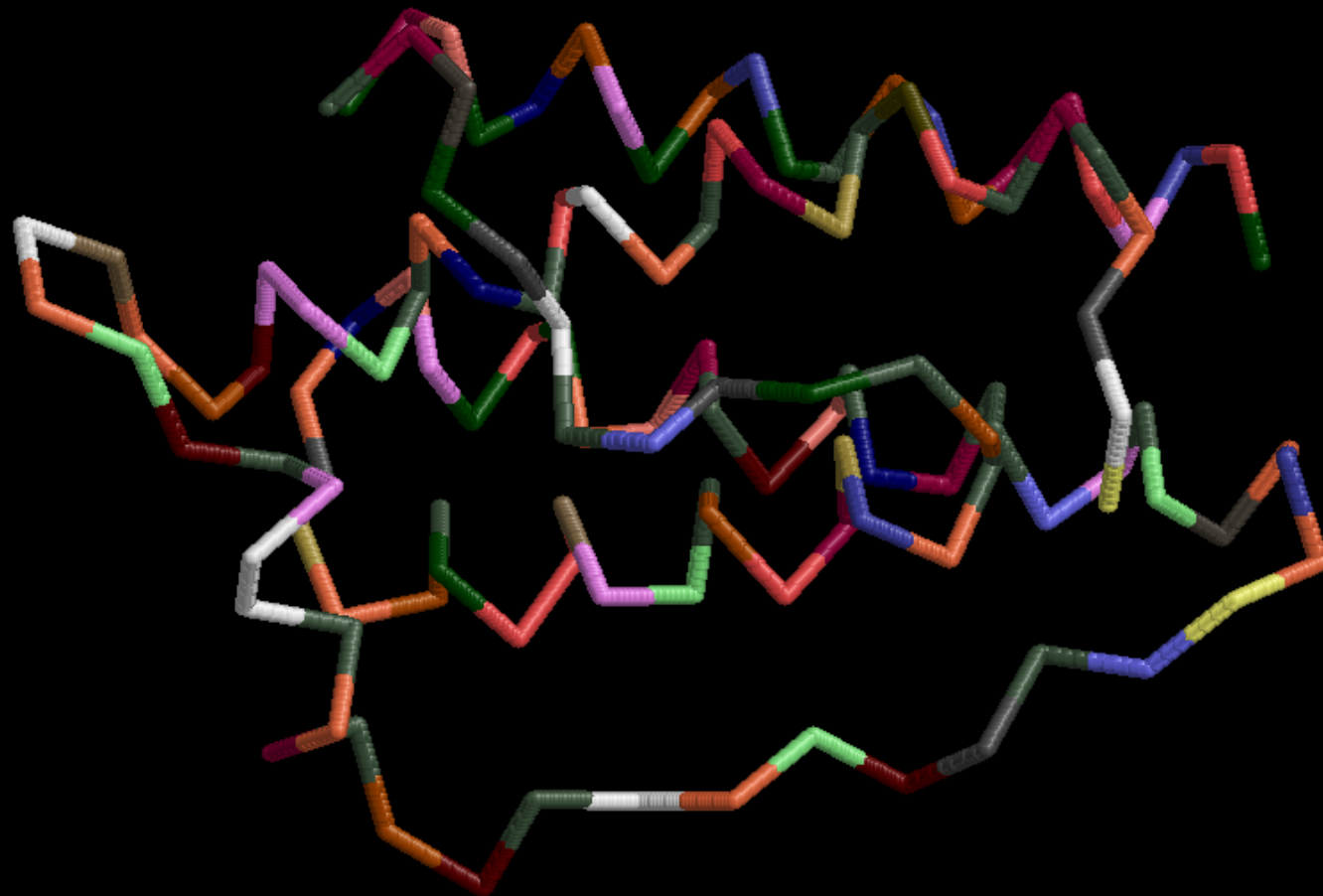
Estrutura primária da leptina humana (1AX8)
(Zhang, Beals, Briggs, Clawson, Wery, Schevitz, 1997)

A leptina humana é um hormônio que regula o apetite e está relacionado com a obesidade (Goodsell, 2012). A ilustração ao lado foi desenvolvida utilizando os comandos *display backbone* e *colours shapely* para mostrar a estrutura primária da proteína, sendo que cada tipo de aminoácido é identificado por uma cor diferente.

Referências:

Goodsell D. Molecule of the month: leptin. 2012 May [acesso 24 fev 2024]. Disponível em: <https://pdb101.rcsb.org/motm/149>.

Zhang F, Beals JM, Briggs SL, Clawson DK, Wery JP, Schevitz RW. Human obesity protein, leptin. 1997 Oct 31 [acesso 24 fev 2024]. Disponível em: <https://www.rcsb.org/structure/1ax8>.



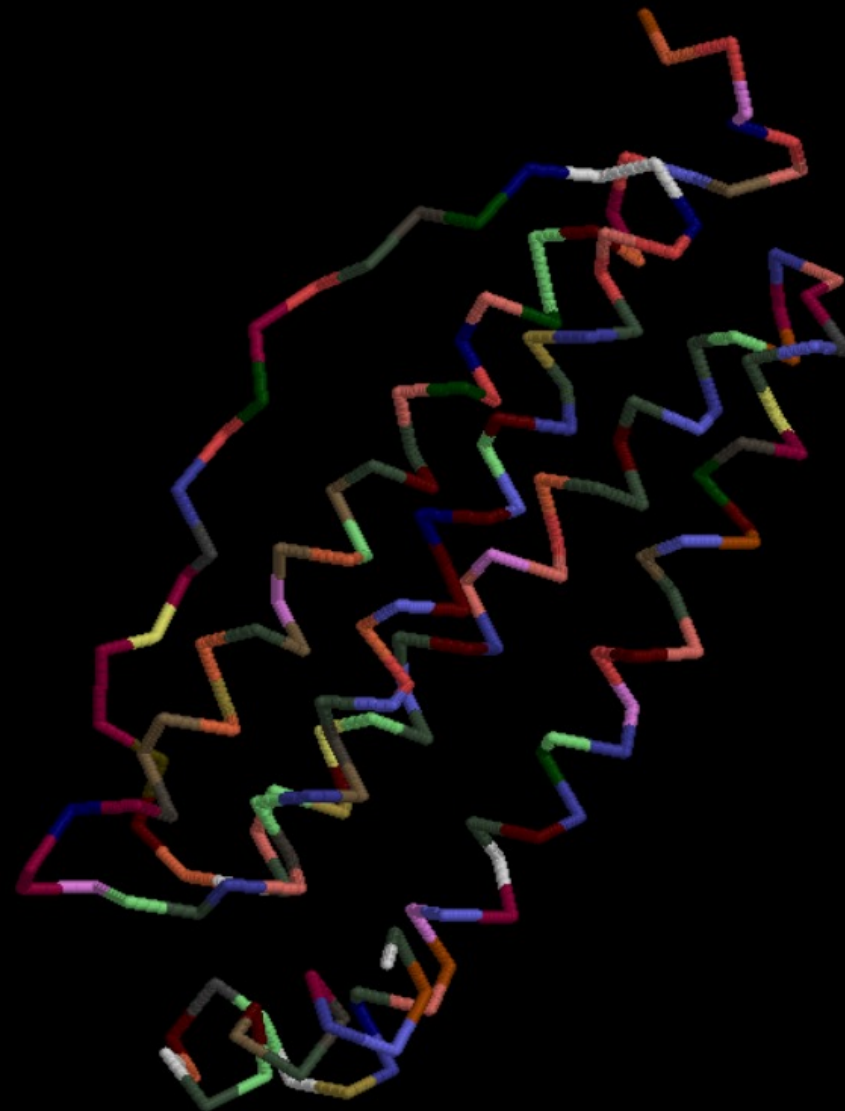
Estrutura primária monomérica da ferritina humana (1FHA) (Artymiuk, Harrison, 1990)

A ferritina humana é a proteína responsável pelo armazenamento de ferro, que ocorre no interior de um invólucro proteico formado por 24 unidades da proteína (Goodsell, 2002). A ilustração ao lado foi desenvolvida utilizando os comandos *display backbone* e *colours shapely* para mostrar a estrutura primária da proteína, sendo que cada tipo de aminoácido é identificado por uma cor diferente.

Referências:

Artymiuk PJ, Harrison PM. Solving the structure of human h ferritin by genetically engineering intermolecular crystal contacts. 1990 Dec 20 [acesso 01 mar 2024]. Disponível em: <https://www.rcsb.org/structure/1FHA>.

Goodsell D. Molecule of the month: ferritin and transferrin. 2002 Nov [acesso 01 mar 2024]. Disponível em: <https://pdb101.rcsb.org/motm/35>.



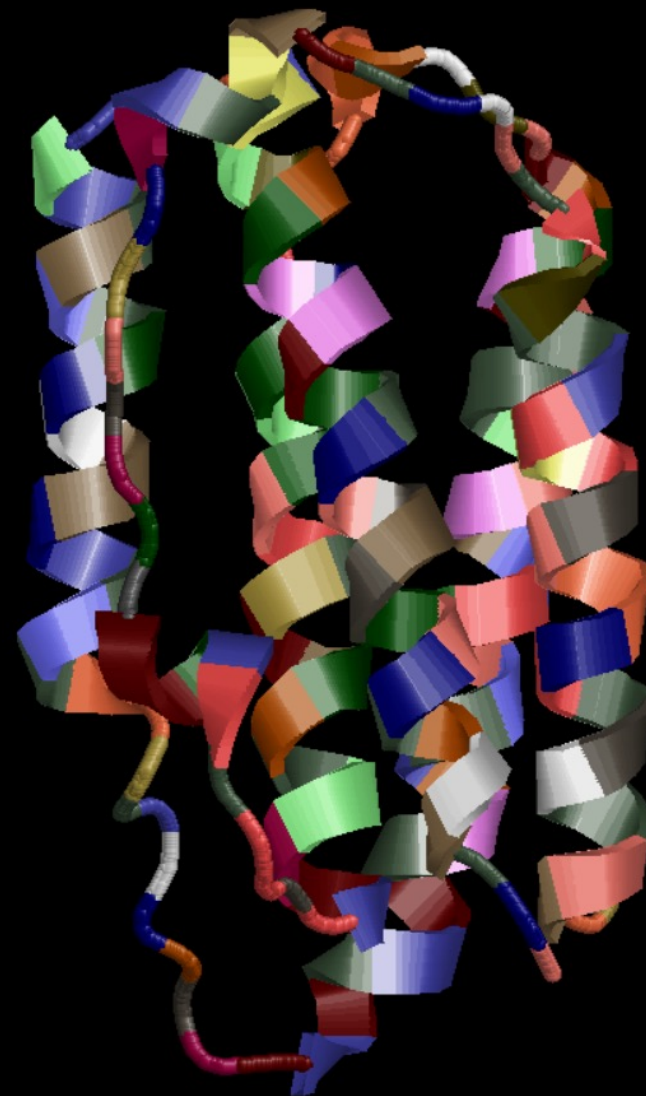
Estrutura primária do interferon beta humano (1AU1) (Karpusas, Nolte, Lipscomb, 1997)

O interferon beta humano corresponde a um dos membros mais comuns da família de interferons. É produzido pela maioria das células, especialmente nas células do sistema imunológico (Goodsell, 2010). A ilustração ao lado foi desenvolvida utilizando os comandos *display cartoons* e *colours shapely* para mostrar a estrutura primária da proteína, sendo que cada tipo de aminoácido é identificado por uma cor diferente.

Referências:

Goodsell D. Molecule of the month: interferons. 2010 Aug [acesso 01 mar 2024]. Disponível em: <https://pdb101.rcsb.org/motm/128>.

Karpusas M, Nolte M, Lipscomb W. Human interferon-beta crystal structure. 1997 Sep 09 [acesso 01 mar 2024]. Disponível em: <https://www.rcsb.org/structure/1au1>.



Estrutura primária da topoisomerase e do DNA humano (1A36) (Stewart, Redinbo, Qiu, Champoux, Hol, 1998)

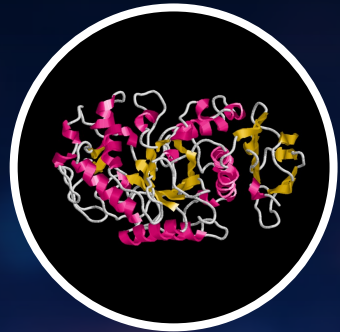
A topoisomerase é a enzima responsável por separar as fitas de DNA durante a replicação (Goodsell, 2006). A ilustração ao lado foi desenvolvida utilizando os comandos *wireframe off, display backbone, colour shapely* para mostrar a estrutura primária da proteína; e os comandos *select nucleic, trace 500, select da, colour yellowtint, select dc, colour greentint, select dg, colour pinktint, select dt, colour bluetint* para apresentar a estrutura primária da proteína. Assim cada aminoácido e cada nucleotídeo estão representados em uma cor diferente.

Referências:

Goodsell D. Molecule of the month: topoisomerases. 2006 Jan [acesso 02 mar 2024]. Disponível em: <https://pdb101.rcsb.org/motm/73>.

Stewart L, Redinbo MR, Qiu X, Hol WG, Champoux JJ. Topoisomerase I/DNA complex. 1998 Jan 29 [acesso 02 mar 2024]. Disponível em: <https://www.rcsb.org/structure/1A36>.





PARTE II:

ESTRUTURA SECUNDÁRIA DE PROTEÍNAS

A estrutura secundária de uma proteína refere-se a uma estrutura local da cadeia polipeptídica, que é determinada por meio de ligações de hidrogênio entre o oxigênio do grupo carbonila de uma ligação peptídica e o hidrogênio amídico de outra ligação peptídica vizinha. Existem dois tipos de estrutura secundária básicos: a alfa-hélice e a folha beta pregueada (Hassunuma, Garcia, Messias, 2018).

Estrutura secundária da aquaporina-1 humana (1H6I) (De Groot, Engel, Grubmuller, 2001)

A aquaporina 1 é uma proteína transmembrana que cria um canal para as moléculas de água atravessarem as membranas celulares. Portanto, desempenha um papel essencial na regulação da osmose (Goodsell, 2014). A ilustração ao lado foi desenvolvida utilizando os comandos *display cartoons e colours structure* para mostrar a estrutura secundária da proteína, onde é possível observar que a proteína apresenta apenas alfa-hélices representadas como espirais em magenta.

Referências:

De Groot BL, Engel A, Grubmuller H. A refined structure of human aquaporin 1. 2001 Jun 15 [acesso 25 fev 2024]. Disponível em: <https://www.rcsb.org/structure/1H6I>.

Goodsell D. Molecule of the month: aquaporin. 2014 May [acesso 25 fev 2024]. Disponível em: <https://pdb101.rcsb.org/motm/173>.



Estrutura secundária do receptor de vitamina D humano (1J78) (Verboven, Rabijns, De Maeyer, Van Baelen, Bouillon, De Ranter, 2001)

O receptor de vitamina D corresponde a uma proteína ao qual a vitamina se liga em células-alvo, regulando a síntese de diversas outras proteínas envolvidas no metabolismo de cálcio (Goodsell, 2012). A ilustração ao lado foi desenvolvida utilizando os comandos *display cartoons e colours structure* para mostrar a estrutura secundária da proteína, onde é possível observar que a proteína apresenta apenas alfa-hélices representadas como espirais em magenta.

Referências:

Goodsell D. Molecule of the month: vitamin D receptor. 2012 Nov [acesso 29 fev 2024]. Disponível em: <https://pdb101.rcsb.org/motm/155>.

Verboven C, Rabijns A, De Maeyer M, Van Baelen H, Bouillon R, De Ranter C. Crystallographic analysis of the human vitamin D binding protein. 2001 May 16 [acesso 29 fev 2024]. Disponível em: <https://www.rcsb.org/structure/1j78>.



Estrutura secundária do domínio SH₃ da espectrina humana (5FW9) (Gallego, Navarro, Ventura, Reverter, 2016)

A espectrina humana é uma proteína presente no citoesqueleto que auxilia a manter a estabilidade e a estrutura da membrana plasmática e o formato da célula (Zhang, Zhang, Zhao, Li, 2013). A ilustração ao lado foi desenvolvida utilizando os comandos *display cartoons e colours structure* para mostrar a estrutura secundária da proteína, onde é possível observar que a proteína apresenta apenas fitas beta representadas como setas em amarelo.

Referências:

Gallego P, Navarro S, Ventura S, Reverter D. Human spectrin SH₃ domain D48G, E7Y, K60Y. 2016 Feb 12 [acesso 02 mar 2024]. Disponível em: <https://www.rcsb.org/structure/5FW9>.

Zhang R, Zhang C, Zhao Q, Li D. Spectrin: structure, function and disease. Sci China Life Sci [Internet]. 2013 Dec [acesso 02 mar 2024];56(12):1076-85. Disponível em: <https://link.springer.com/article/10.1007/s11427-013-4575-0>.



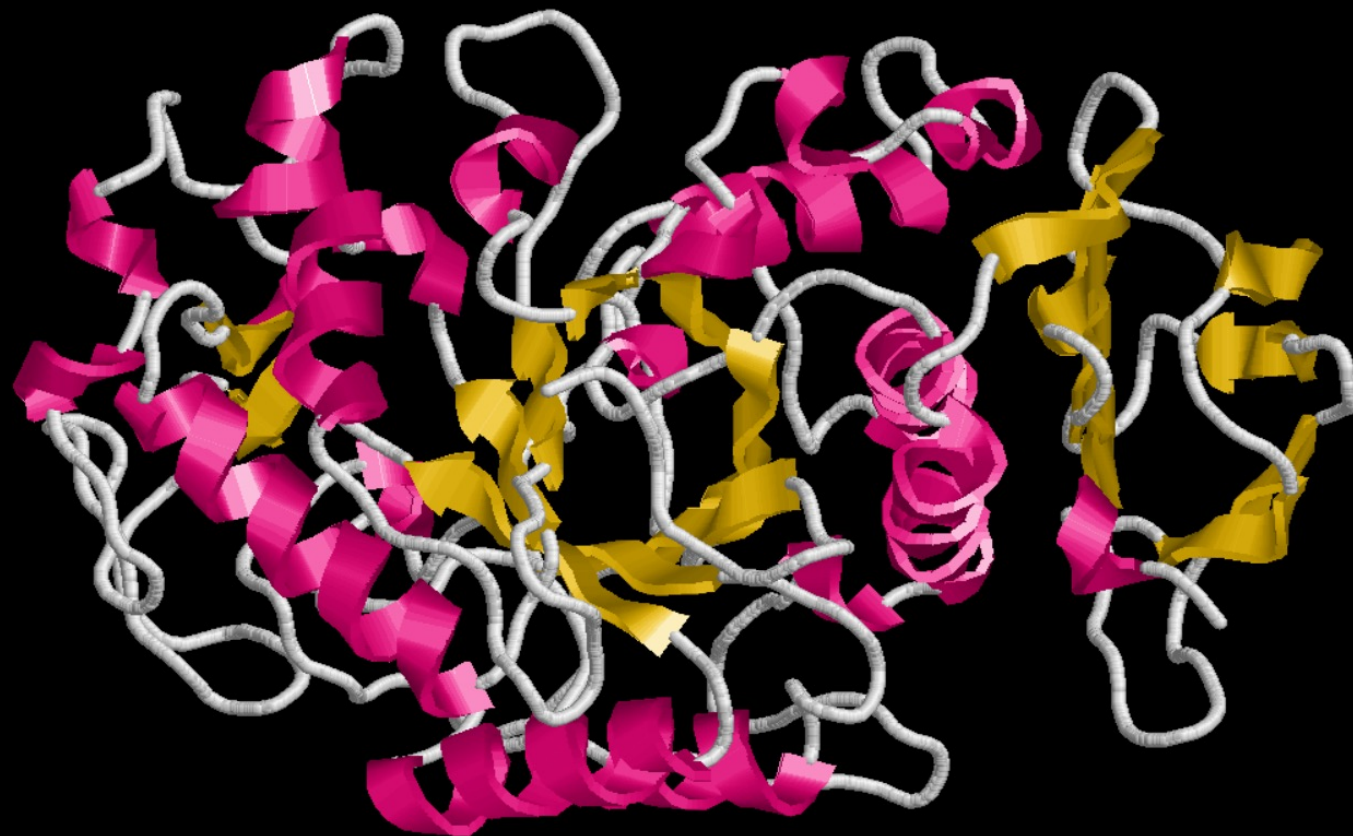
Estrutura secundária da amilase salivar humana (1SMD) (Ramasubbu, 1996)

A amilase salivar humana é a principal enzima responsável pela digestão de carboidratos (Goodsell, 2006). A ilustração ao lado foi desenvolvida utilizando os comandos *display cartoons e colours structure* para mostrar a estrutura secundária da proteína, com alfa-hélices representadas como espirais em magenta e fitas betas como setas em amarelo.

Referências:

Goodsell D. Molecule of the month: alpha-amylase. 2006 Feb [acesso 23 fev 2024]. Disponível em: <https://pdb101.rcsb.org/motm/74>.

Ramasubbu N. Human salivary amylase. 1996 Jan 24 [acesso 21 fev 2024]. Disponível em: <https://www.rcsb.org/structure/1SMD>.



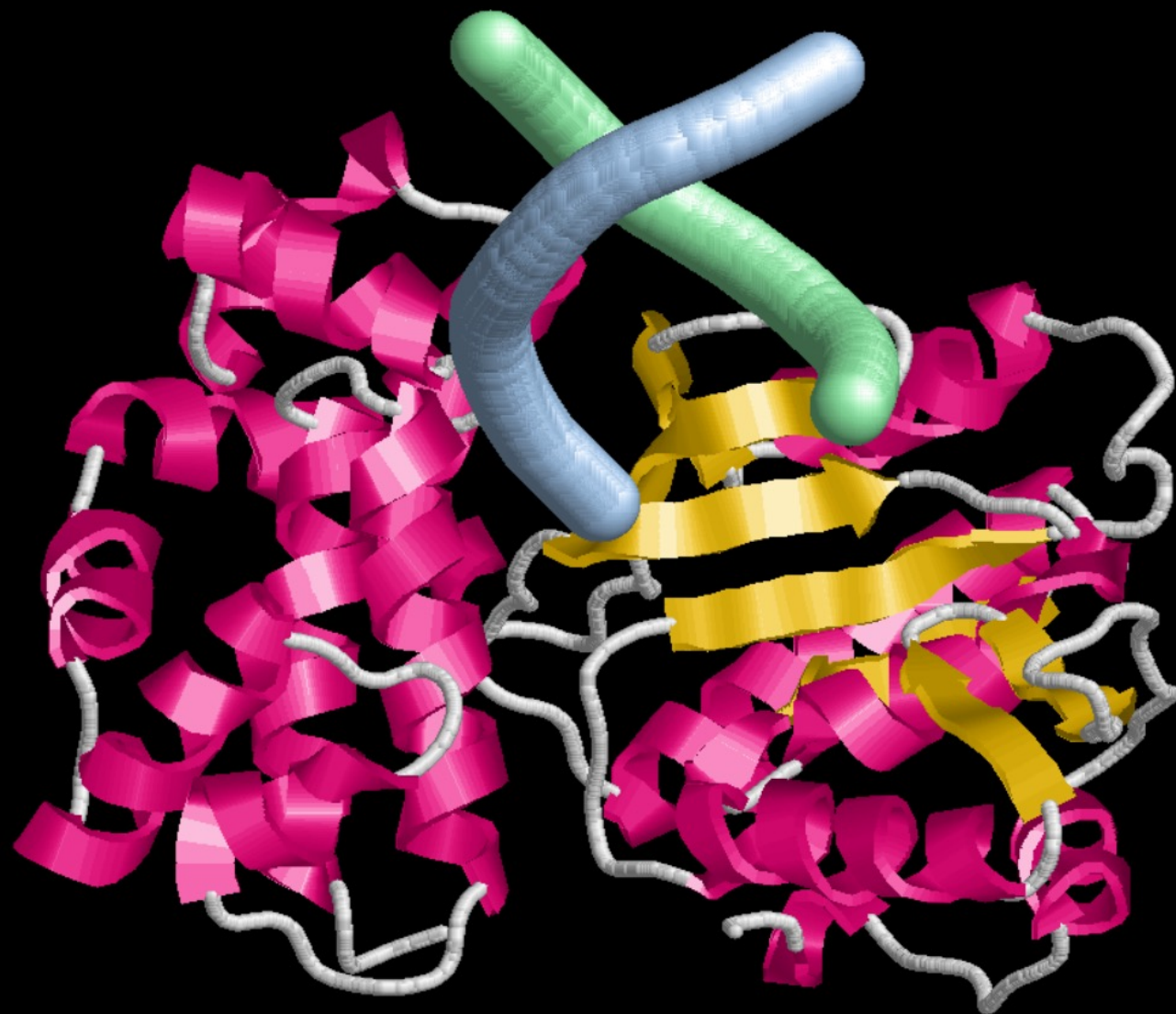
Estrutura secundária da DNA polimerase e do DNA humano (1ZQA) (Pelletir, Sawaya, 1996)

A DNA polimerase participa do processo de replicação do DNA (Goodsell, 2006). A ilustração ao lado foi desenvolvida utilizando os comandos *display cartoons e colours structure* para mostrar a estrutura secundária da proteína, com alfa-hélices representadas como espirais em magenta e fitas betas como setas em amarelo. A estrutura secundária em dupla hélice da molécula de DNA foi exibida usando os comandos *select *p, colour bluetint, select *t, colour greentint, select *p, *t, e trace 500*.

Referências:

Goodsell D. Molecule of the month: DNA polymerase. 2000 Mar [acesso 02 mar 2024]. Disponível em: <https://pdb101.rcsb.org/motm/3>.

Pelletir H, Sawaya MR. DNA polymerase beta (pol b) (e.c.2.7.7.7) complexed with seven base pairs of DNA; soaked in the presence of kcl (150 millimolar) at pH 7.5. 1996 Apr 12 [acesso 02 mar 2024]. Disponível em: <https://www.rcsb.org/structure/1ZQA>.



Estrutura secundária da molécula transportadora de glicose 1 humana GLUT1 (4PYP) (Deng, Yan, Xu, Wu, Sun, Hu, Yan, 2014)

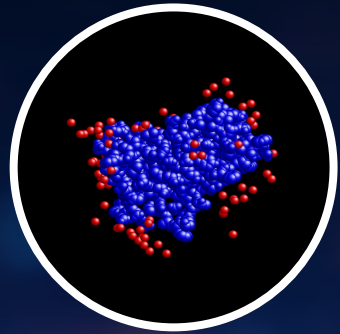
A molécula transportadora de glicose 1 humana é uma molécula transmembrana, responsável por captar a glicose para o interior da célula (Goodsell, 2017). A ilustração ao lado foi desenvolvida utilizando os comandos *display strands e colours structure* para mostrar a estrutura secundária da proteína, com alfa-hélices representadas como espirais em magenta. O ligante nonil beta-D-glicopiranosídeo é exibido usando os comandos *select bng, display spacefill e colour brown*.

Referências:

Deng D, Yan CY, Xu C, Wu JP, Sun PC, Hu MX, Yan N. Crystal structure of the human glucose transporter GLUT1. 2014 Mar 27 [acesso 02 mar 2024]. Disponível em: <https://www.rcsb.org/structure/4PYP>.

Goodsell D. Molecule of the month: glucose transporters. 2017 Apr [acesso 02 mar 2024]. Disponível em: <https://pdb101.rcsb.org/motm/208>.





PARTE III:

ESTRUTURA TERCIÁRIA DE PROTEÍNAS

A estrutura terciária de uma proteína consiste na sua organização tridimensional, a qual é estabilizada por interações entre os grupos funcionais das cadeias laterais do tipo: ligações dissulfeto covalentes, ligações de hidrogênio, pontes salinas, interações hidrofóbicas e ligações iônicas. Este nível estrutural permite que a proteína desempenhe a sua função (Hassunuma, Garcia, Messias, 2018).

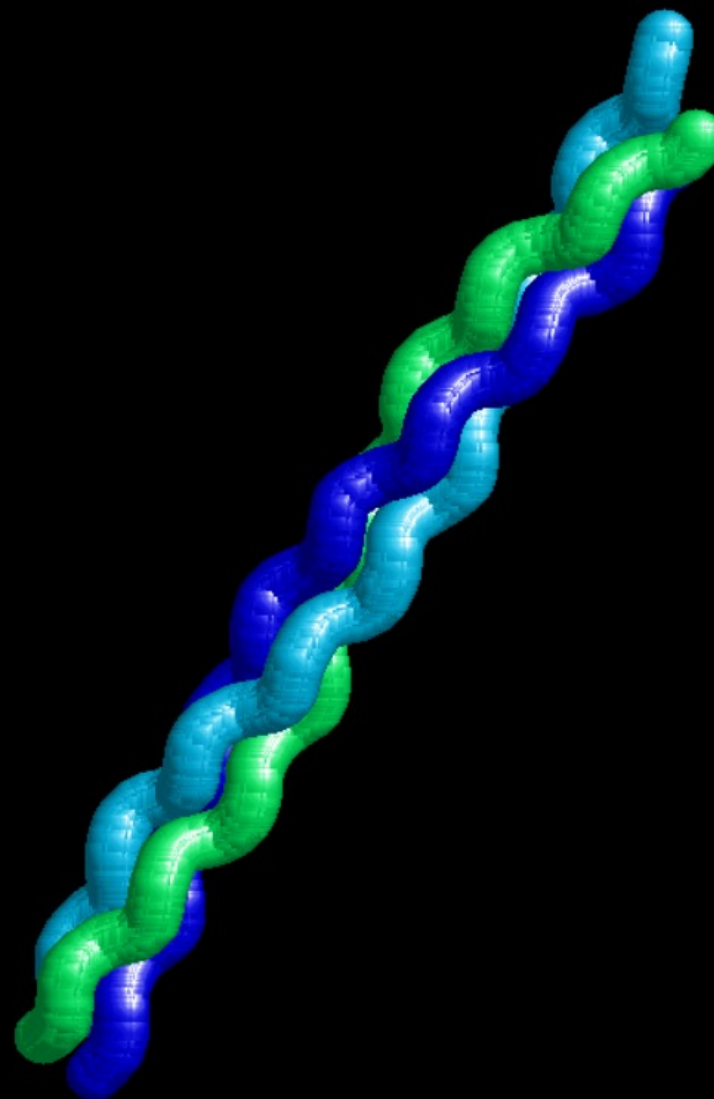
Estrutura terciária do colágeno tipo II (6JEC)
(Yang, Zhu, Ye, Zhang, 2019)

O colágeno corresponde a uma proteína fibrosa que desempenha importante função estrutural em nosso organismo (Goodsell, 2000). A ilustração ao lado foi desenvolvida utilizando os comandos *wireframe off*, *display trace 500* e *colours chain* para mostrar sua estrutura terciária fibrosa.

Referências:

Goodsell D. Molecule of the month: collagen. 2000 Apr [acesso 01 mar 2024]. Disponível em: <https://pdb101.rcsb.org/motm/4>.

Yang X, Zhu Y, Ye S, Zhang R. Structure of a triple-helix region of human collagen type II. 2019 Feb 05 [acesso 01 mar 2024]. Disponível em: <https://www.rcsb.org/structure/6JEC>.



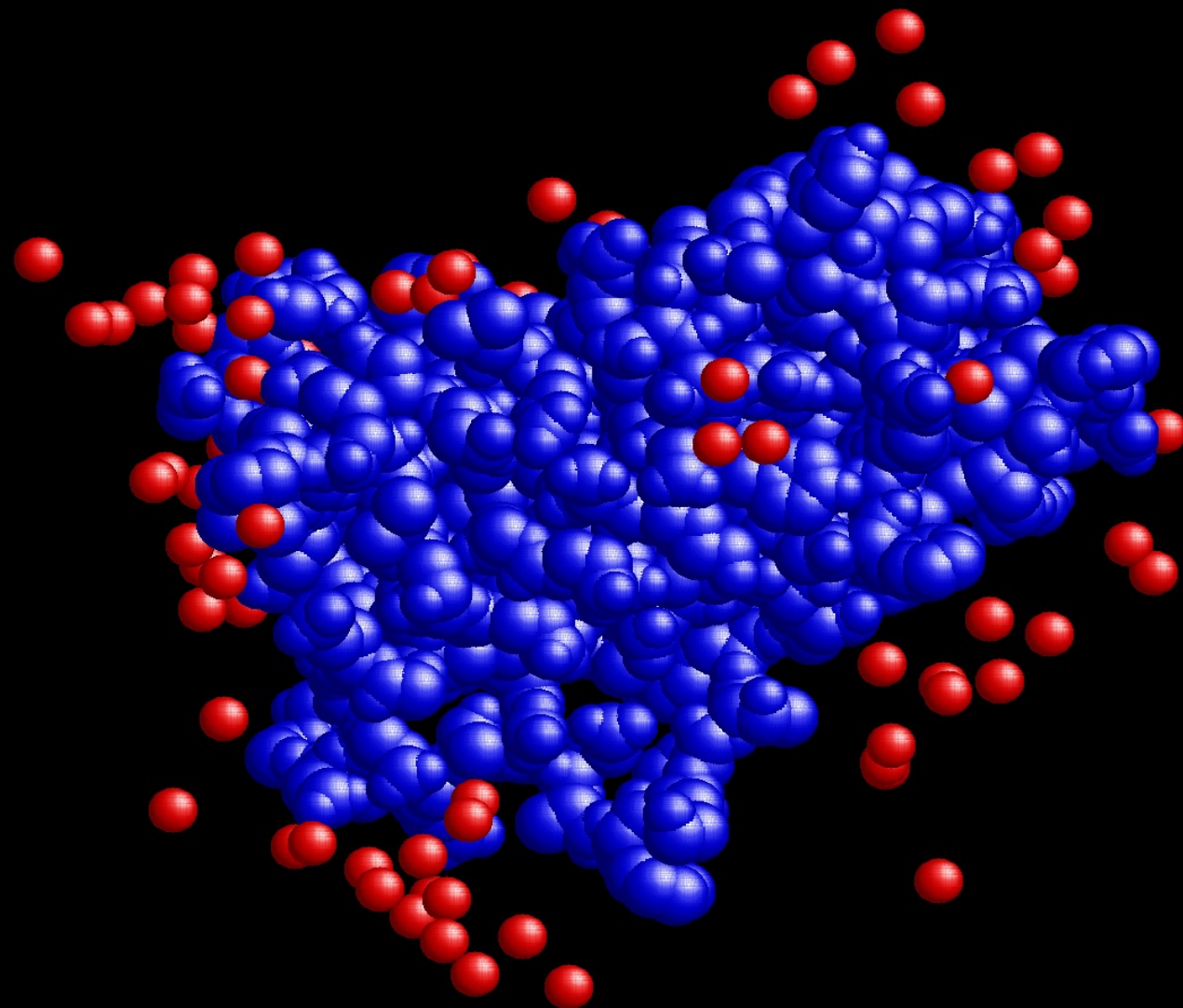
Estrutura terciária do hormônio do crescimento humano (1HGU) (Chantalat, Jones, Korber, Navaza, Pavlovsky, 1995)

O hormônio do crescimento humano é uma proteína globular produzida pela hipófise e que estimula o crescimento em crianças. Além disso, participa da regulação do metabolismo, reduz a quantidade de gordura em células adiposas, estimula a síntese de proteínas e regula a glicemia (Dutta, Goodsell, 2004). A ilustração ao lado foi desenvolvida utilizando os comandos *display spacefill* e *colours chain* para mostrar sua estrutura terciária globular. As esferas em vermelho representam átomos de oxigênio de moléculas de água junto à proteína.

Referências:

Chantalat L, Jones N, Korber F, Navaza J, Pavlovsky AG. Human growth hormone. 1995 May 11 [acesso 23 fev 2024]. Disponível em: <https://www.rcsb.org/structure/1hgu>.

Dutta S, Goodsell D. Molecule of the month: growth hormone. 2004 Apr [acesso 23 fev 2024]. Disponível em: <https://pdb101.rcsb.org/motm/52>.



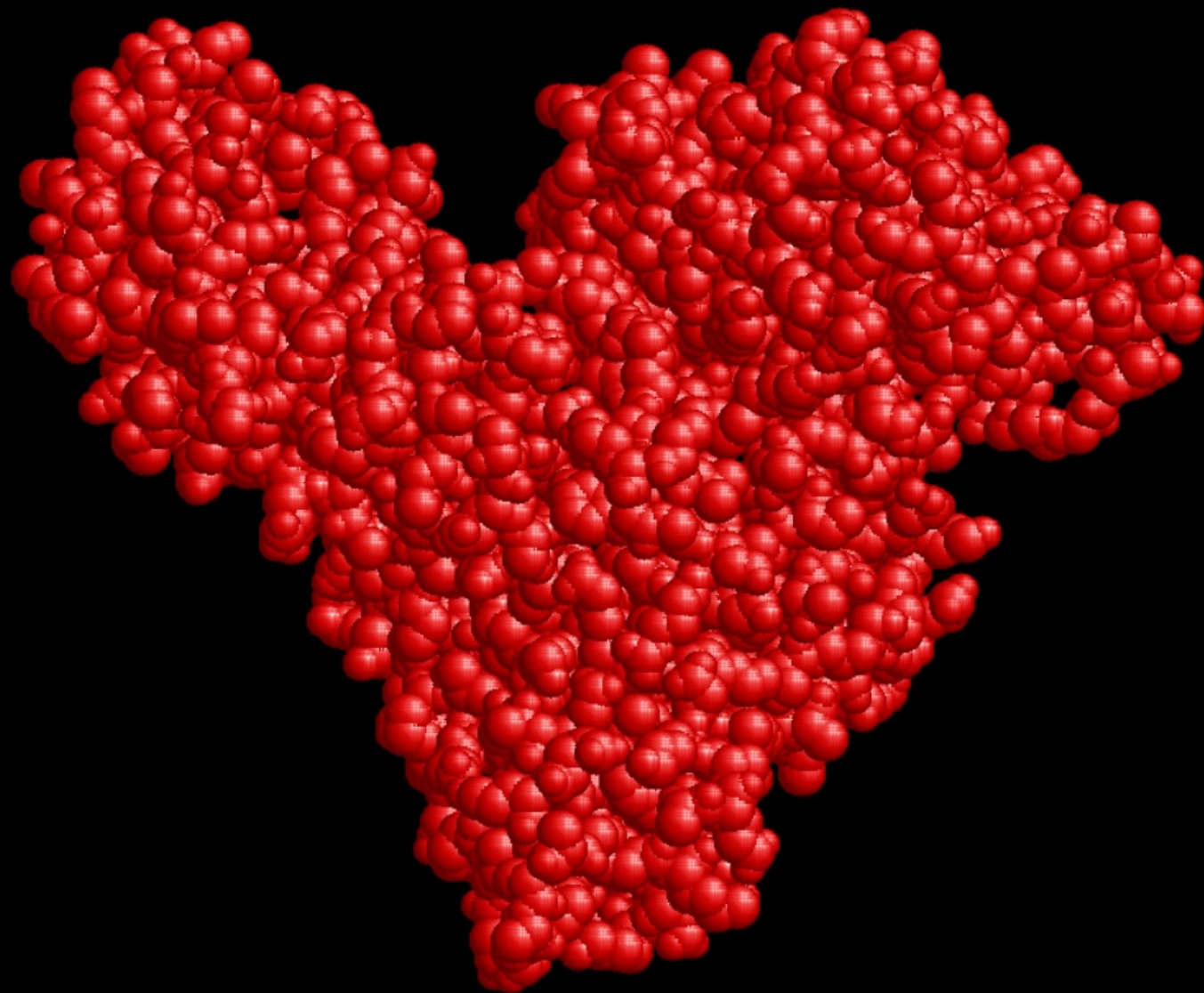
Estrutura terciária da albumina sérica humana (1E7I) (Bhattacharya, Gruene, Curry, 2000)

A albumina sérica humana é a proteína mais abundante do sangue, possui diversas funções, entre elas o transporte de ácidos graxos (Goodsell, 2003). A ilustração ao lado foi desenvolvida utilizando os comandos *display spacefill* e *colour red* para mostrar sua estrutura terciária globular. Interessantemente, esta proteína tem um formato que lembra um coração.

Referências:

Bhattacharya AA, Gruene T, Curry S. Human serum albumin complexed with octadecanoic acid (stearic acid). 2000 Aug 29 [acesso 02 mar 2024]. Disponível em: <https://www.rcsb.org/structure/1E7I>.

Goodsell D. Molecule of the month: serum albumin. 2003 Jan [acesso 02 mar 2024]. Disponível em: <https://pdb101.rcsb.org/motm/37>.



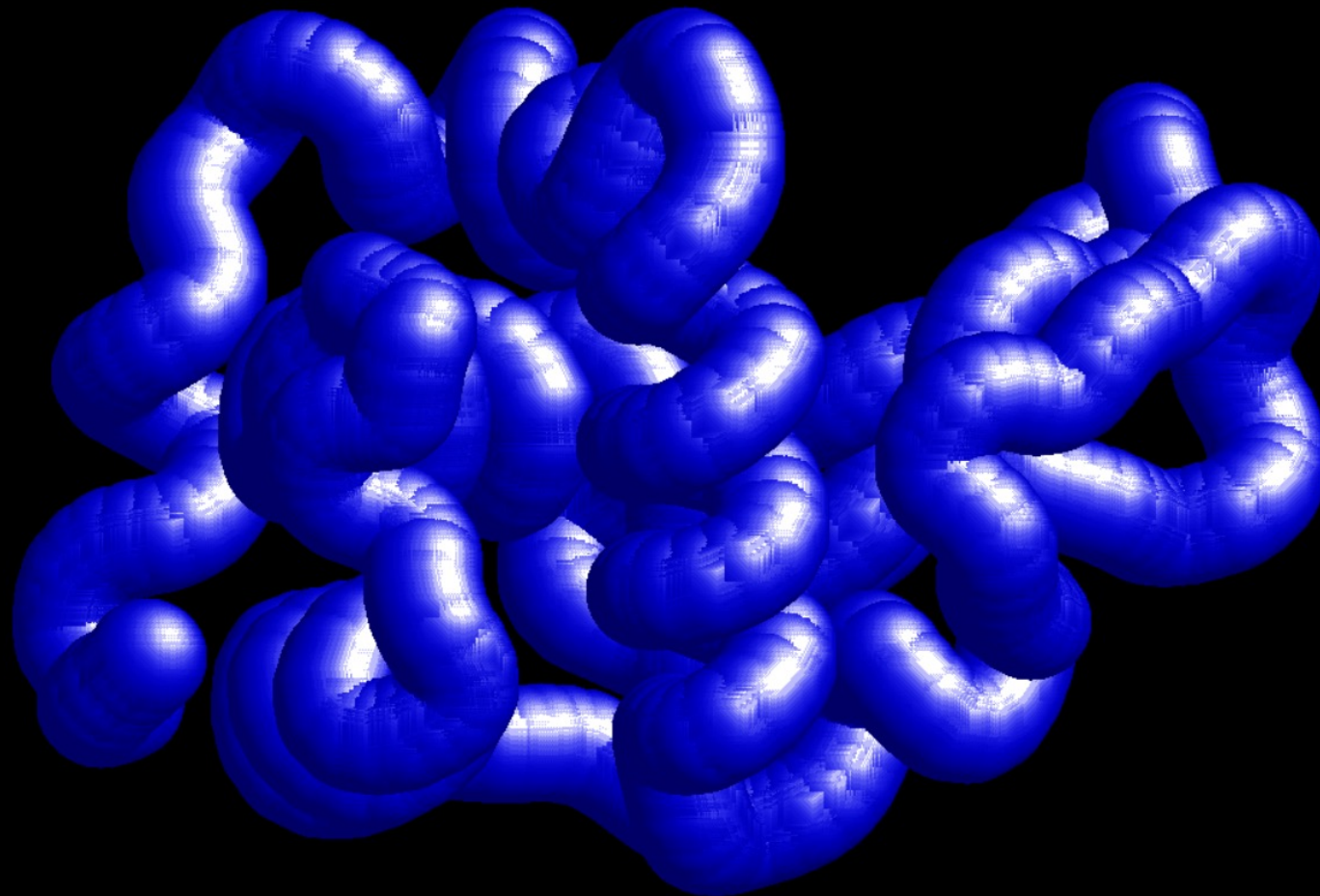
**Estrutura terciária da lisozima humana (1RE2)
(Muraki, Harata, Sugita, Sato, 1999)**

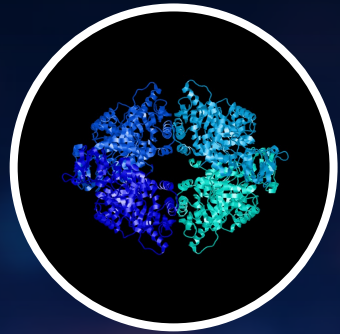
A lisozima humana é uma enzima que participa da destruição de bactérias, atacando a sua parede celular (Goodsell, 2000). A ilustração ao lado foi desenvolvida utilizando os comandos *wireframe off*, *trace 500* e *colour chain* para mostrar sua estrutura terciária globular.

Referências:

Goodsell D. Molecule of the month: lysozyme. 2000 Sep [acesso 02 mar 2024]. Disponível em: <https://pdb101.rcsb.org/motm/9>.

Muraki M, Harata K, Sugita N, Sato K. Human lysozyme labelled with two 2',3'-epoxypropyl beta-glycoside of n-acetyllactosamine. 1998 Nov 05 [acesso 02 mar 2024]. Disponível em: <https://www.rcsb.org/structure/1RE2>.





PARTE IV:

ESTRUTURA QUATERNÁRIA DE PROTEÍNAS

A estrutura quaternária ocorre em proteínas que apresentam várias cadeias, sendo organizadas em um complexo formado por duas ou mais cadeias polipeptídicas unidas por interações não covalentes (atrações eletrostáticas, ligações de hidrogênio e interações hidrofóbicas) ou, em alguns casos, covalentes (Hassunuma, Garcia, Messias, 2018).

Estrutura quaternária da caspase-1 humana (1ICE) (Wilson, Griffith, Kim, Navia, 1994)

A caspase-1 humana corresponde a uma das enzimas que participam do processo de apoptose, clivando determinadas proteínas de forma específica (Goodsell, 2004). A ilustração ao lado foi desenvolvida utilizando os comandos *wireframe off*, *trace 500* e *colours chain* para exibir sua estrutura quaternária, onde cada uma das suas duas cadeias é representada em uma cor diferente.

Referências:

Goodsell D. Molecule of the month: caspases. 2004 Aug [acesso 02 mar 2024]. Disponível em: <https://pdb101.rcsb.org/motm/56>.

Wilson KP, Griffith JP, Kim EE, Navia MA. Structure and mechanism of interleukin-1 beta converting enzyme. 1994 Sep 29 [acesso 02 mar 2024]. Disponível em: <https://www.rcsb.org/structure/1ICE>.



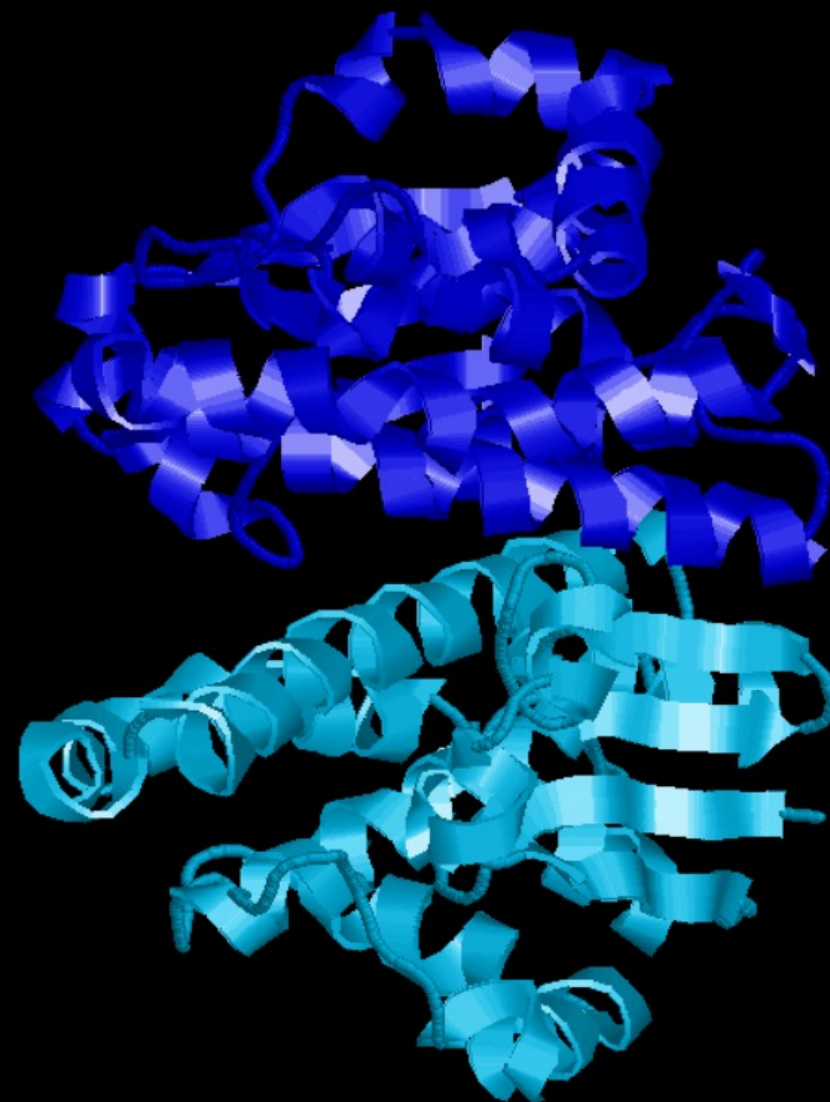
Estrutura quaternária da glutathione transferase P1-1 humana (3GSS) (Oakley, Rossjohn, Parker, 1996)

A glutathione transferase P1-1 humana corresponde a uma das moléculas responsáveis pela remoção de toxinas do interior das células (Goodsell, 2017). A ilustração ao lado foi desenvolvida utilizando os comandos *display cartoons e colours chain* para exibir sua estrutura quaternária, onde cada uma das suas duas cadeias é representada com uma cor diferente.

Referências:

Goodsell D. Molecule of the month: glutathione transferases. 2017 Aug [acesso 02 mar 2024]. Disponível em: <https://pdb101.rcsb.org/motm/41>.

Oakley AJ, Rossjohn J, Parker MW. Human glutathione S-transferase P1-1 in complex with ethacrynic acid-glutathione conjugate. 1996 Oct 29 [acesso 02 mar 2024]. Disponível em: <https://www.rcsb.org/structure/3GSS>.



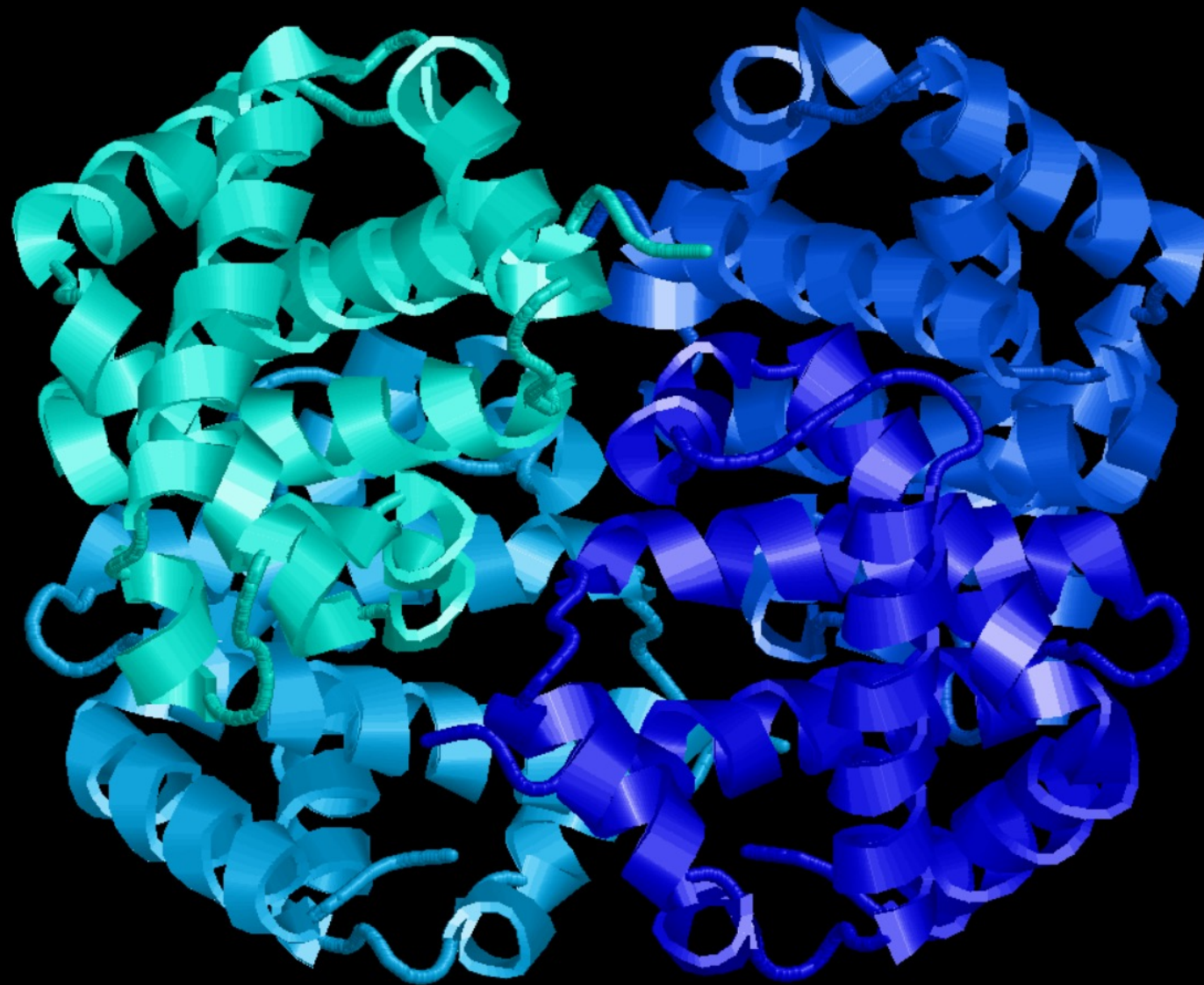
Estrutura quaternária da hemoglobina A humana (1BZ0) (Kavanaugh, Arnone, 1998)

A hemoglobina A humana é uma proteína presente em hemácias, responsável pelo transporte de oxigênio no sangue (Dutta, Goodsell, 2003). A ilustração ao lado foi desenvolvida utilizando os comandos *display cartoons e colours chain* para exibir sua estrutura quaternária, onde cada uma das suas quatro cadeias é representada em uma cor diferente.

Referências:

Dutta S, Goodsell D. Molecule of the month: hemoglobin. 2003 May [acesso 29 fev 2024]. Disponível em: <https://pdb101.rcsb.org/motm/41>.

Kavanaugh JS, Arnone A. Hemoglobin A (human, deoxy, high salt). 1998 Nov 04 [acesso 29 fev 2024]. Disponível em: <https://www.rcsb.org/structure/1BZ0>.



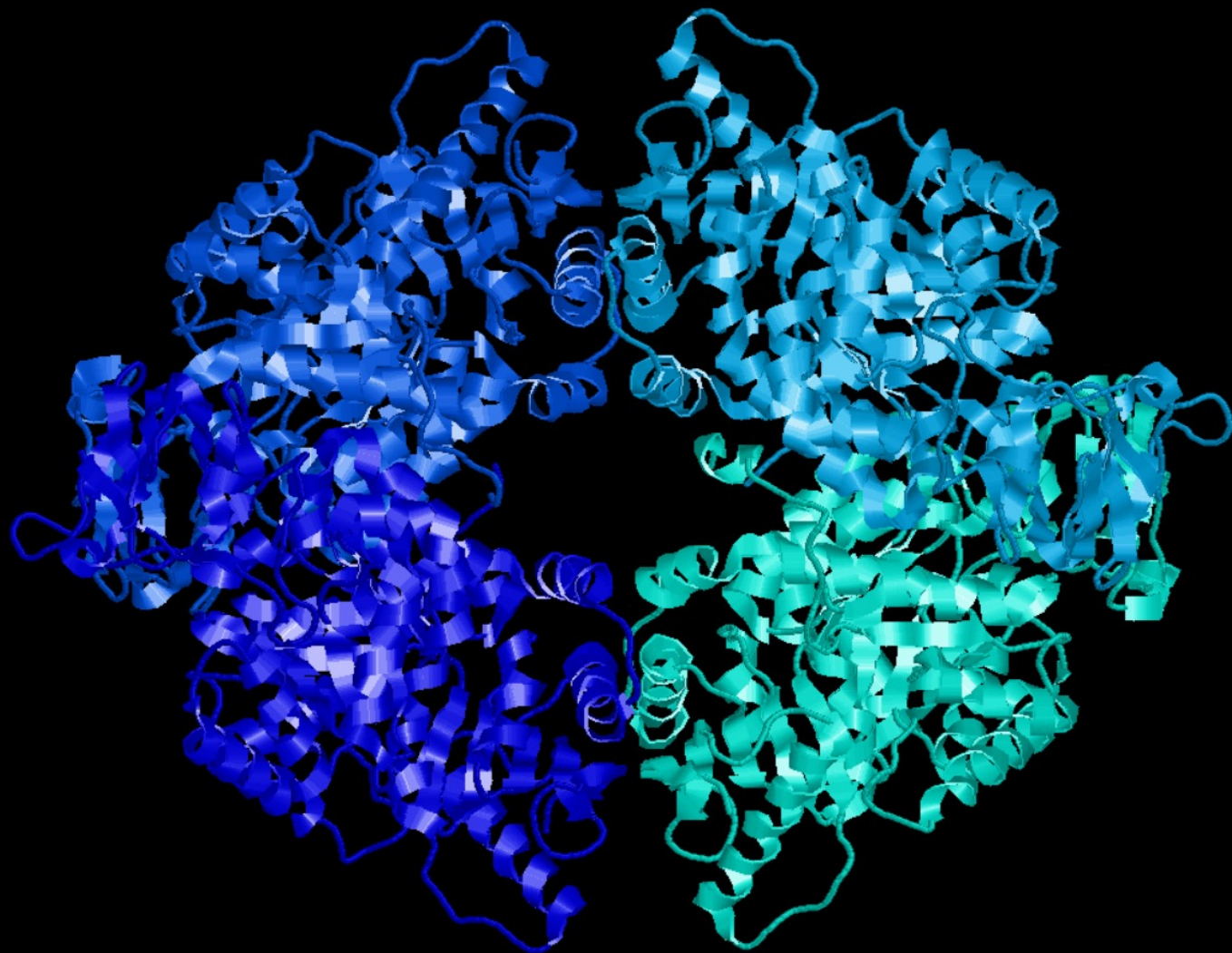
Estrutura quaternária da piruvato quinase humana (4FXF) (Walkinshaw, Morgan, 2012)

A piruvato quinase humana corresponde à enzima que catalisa a última etapa da glicólise em que ocorre a transferência de um grupo fosfato do fosfoenolpiruvato para formar uma molécula de piruvato e uma de adenosina trifosfato (Ahmed, Ash, Patel, Sanders, Goodsell, Dutta, 2022). A ilustração ao lado foi desenvolvida utilizando os comandos *display cartoons e colours chain* para exibir sua estrutura quaternária, onde cada uma das suas quatro cadeias é representada em uma cor diferente.

Referências:

Ahmed F, Ash J, Patel T, Sanders A, Goodsell D, Dutta S. Molecule of the month: pyruvate kinase M2. 2022 Jun [acesso 25 fev 2024]. Disponível em: <https://pdb101.rcsb.org/motm/270>.

Walkinshaw MD, Morgan HP. Structure of M2 pyruvate kinase in complex with phenylalanine. 2012 Jul 03 [acesso 25 fev 2024]. Disponível em: <https://www.rcsb.org/structure/4fxf>.



Créditos das figuras

Créditos da foto da capa, folha de rosto, páginas capitulares e contracapa

Fonte: Geralt. Ai Generated Particles Waves royalty-free stock illustration [Internet]. Sem data [acesso 21 fev 2024]. Disponível em: <https://pixabay.com/illustrations/ai-generated-particles-waves-8334304/>. Figura registrada como: *Free for use & download*.

Créditos das imagens produzidas no software RasMol na capa e nas páginas 8, 9, 15, 22 e 27

Ilustrações desenvolvidas por Renato Massaharu Hassunuma, Victoria Helena do Amaral, Joslayne Pereira Veras e Amanda Lays dos Santos Silva.

Referências e sugestões de leitura

Bernstein HJ, Bernstein FC. Manual RasMol 2.7.5. 2009 [acesso 25 fev 2024]. Disponível em: http://www.rasmol.org/software/RasMol_2.7.5_Manual.html.

Hassunuma RM. Guia de comandos em software de simulação computacional de biomoléculas. 1ª ed. Bauru: Canal 6 Editora; 2017 [acesso 25 fev 2024]. Disponível em: <https://canal6.com.br/livreacesso/livro/guia-de-comandos-em-software-de-simulacao-computacional/>.

Hassunuma RM, Souza AR. Desenvolvimento de scripts em software de simulação computacional para visualização de biomoléculas. 1ª ed. São Paulo: Cultura Acadêmica; 2016 [acesso 25 fev 2024]. Disponível em: <https://www.culturaacademica.com.br/catalogo/desenvolvimento-de-scripts-em-software-de-simulacao-computacional-para-visualizacao-de-biomoleculas/>.

Hassunuma RM, Garcia PC, Messias SHN. Práticas de Bioquímica: simulação computacional no estudo de aminoácidos e proteínas. 1ª ed. Bauru: Canal 6 Editora; 2018 [acesso 25 fev 2024]. Disponível em: <https://canal6.com.br/livreacesso/livro/praticas-de-bioquimica-simulacao-computacional/>.

WWPDB. Protein data bank contents guide: atomic coordinate entry format description version 3.30. 2008 [acesso 25 fev 2024]. Disponível em: ftp://ftp.wwpdb.org/pub/pdb/doc/format_descriptions/Format_v33_A4.pdf.

Este livro é resultado das atividades práticas desenvolvidas na Disciplina de Bioquímica Estrutural do Curso de Biomedicina da Universidade Paulista – UNIP / Câmpus Bauru durante o primeiro semestre de 2024.

Cada capítulo foi desenvolvido por um aluno, sendo apresentada uma proteína, seu código PDB, sua função, algumas informações sobre a imagem e a referência utilizada.

