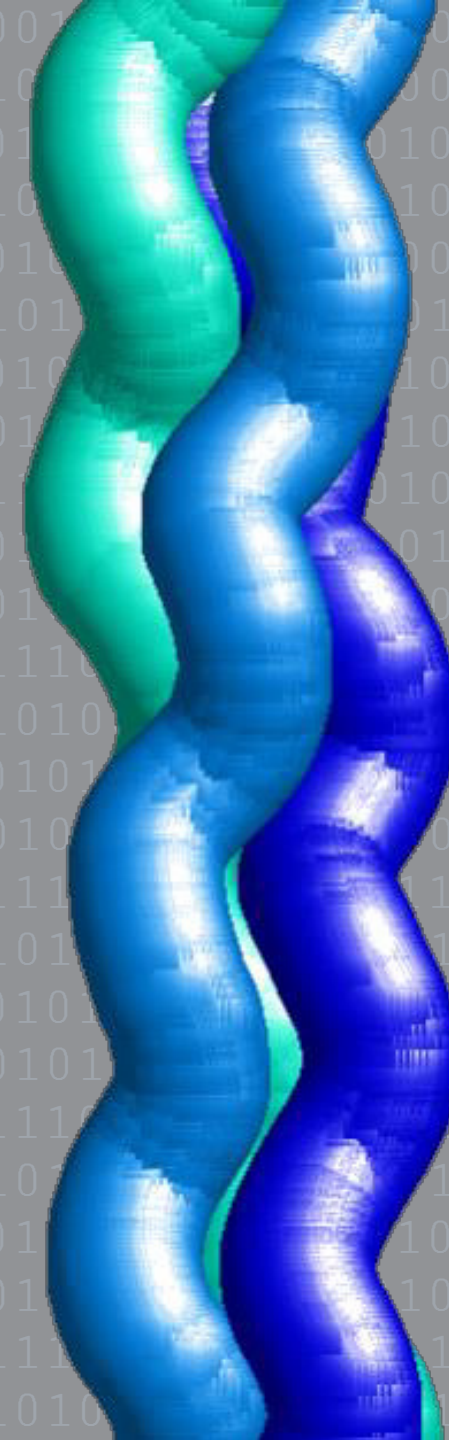


# Práticas de Bioquímica

Simulação Computacional  
no Estudo de Aminoácidos e Proteínas

Renato Massaharu Hassunuma  
Patrícia Carvalho Garcia  
Sandra Heloísa Nunes Messias

canal6 editora



# Práticas de Bioquímica

Simulação Computacional  
no Estudo de Aminoácidos e Proteínas

**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

**canal6** editora

1ª. Edição / 2018

Bauru, SP

© Renato Massaharu Hassunuma.

**Conselho Editorial:**

BIOMÉDICA ANA LAURA SENEDA

*Mestranda em Bases Gerais da Cirurgia pela 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*

**Capa e Design:**

Renato Massaharu Hassunuma.

Figura desenvolvida a partir do arquivo 1BKV.pdb: referente a um peptídeo sintético que contém uma região do colágeno tipo III humano, determinada por técnica de difração de raios X em resolução de 2 Å.

---

CIP – Brasil. Catalogação na Publicação

H355p Práticas de Bioquímica: simulação computacional no estudo de aminoácidos e proteínas. / Renato Massaharu Hassunuma, Patrícia Carvalho Garcia, Sandra Heloísa Nunes Messias. – Bauru. Canal 6, 2018.  
34 f. : il. color

ISBN 978-85-7917-536-7

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

CDU: 577.112

---

# Agradecimentos

Nossos sinceros agradecimentos a **Prof. Aziz Kalaf Filho**, Diretor da Universidade Paulista - UNIP, campus Bauru e **Prof. Dr. Paschoal Laércio Armonia**, Diretor do Instituto de Ciências da Saúde da Universidade Paulista - UNIP, pelo apoio fornecido ao **Curso de Biomedicina da Universidade Paulista - UNIP, campus Bauru** no desenvolvimento de eventos, publicações e projetos de extensão.

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

# Sumário

1. Instalação de software de simulação computacional .....	6
2. Obtenção de arquivos com extensão CIF e PDB .....	7
3. Estrutura dos aminoácidos .....	8
4. Propriedades dos aminoácidos .....	14
5. Estrutura primária das proteínas .....	19
6. Estrutura secundária das proteínas .....	22
7. Estrutura terciária das proteínas .....	24
7.1. Proteínas fibrosas .....	25
7.2. Proteínas globulares .....	27
8. Estrutura quaternária das proteínas .....	29
Referências .....	31

# 1. Instalação de software de simulação computacional

Para as atividades a serem desenvolvidas neste livro, será utilizado o software RasMol, que pode ser obtido gratuitamente no seguinte endereço eletrônico: <http://openrasmol.org/>, clicando em RasMol Latest Windows Installer ou em RasMol 2.7.5 Windows Installer.

O programa deve ser devidamente instalado em um computador conforme as instruções oferecidas durante o procedimento.

## 2. Obtenção de arquivos com extensão CIF e PDB

Nas atividades propostas neste livro, serão utilizados arquivos com extensão .cif e .pdb, que estão disponíveis no site *Protein Data Bank* (disponível em: <https://www.rcsb.org/>). Os arquivos .cif são identificados por um código de 3 caracteres, enquanto os arquivos PDB são identificados por um código de identificação ou entrada único de quatro caracteres, denominado PDBid.

Estes arquivos podem ser visualizados diretamente no próprio site PDB ou em softwares editores de texto. Estes arquivos são divididos em seções que contêm o nome das moléculas, citações bibliográficas, coordenadas atômicas, informações experimentais, informações sobre a estrutura primária e secundária, fatores da estrutura cristalográfica, entre outros. Cada linha do arquivo possui 80 caracteres e inicia com um conjunto de até seis caracteres, alinhados à esquerda e separados por um espaço, que referem-se a abreviaturas dos cabeçalhos das seções (Merka, 2009; WWPDB, 2008).

Serão utilizados nas atividades propostas, os seguintes arquivos:

- 1BKV.pdb: referente a um peptídeo sintético que contém uma região do colágeno tipo III humano
- 1E7I.pdb: referente à albumina humana
- 1TRZ.pdb: referente à insulina humana
- 2HHB.pdb: referente à hemoglobina humana
- 5PEP.pdb: referente à pepsina suína
- GLY.cif: referente ao aminoácido glicina

### 3. Estrutura dos aminoácidos

As proteínas são constituídas por aminoácidos, que têm em comum a presença de: um grupo  $\text{NH}_2$  (grupo amino básico), um grupo  $\text{COOH}$  (grupo carboxila ácido), uma cadeia lateral ou grupo R (que difere os aminoácidos em estrutura, tamanho e carga elétrica) e um átomo de hidrogênio. Estes componentes estão ligados ao carbono central, que é denominado carbono alfa da molécula, em relação à carbonila. Por isso, estes monômeros das proteínas são denominados alfa-aminoácidos (Junqueira, Carneiro, 2012a; Nelson; Cox, 2002).

**ATIVIDADE 1:** Observe a estrutura química da glicina na figura 1 e identifique os componentes do aminoácido:

- Carbono central ou alfa
- Grupo carboxila ácido ( $\text{COOH}$ )
- Grupo amino básico ( $\text{NH}_2$ )
- Átomo de hidrogênio
- Cadeia lateral

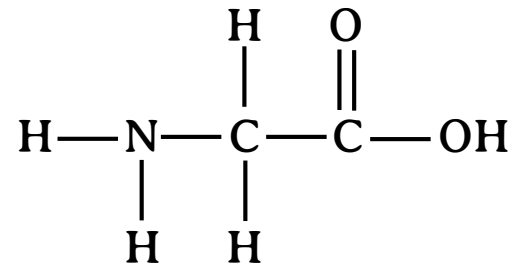


Figura 1 – Estrutura da glicina



**ATIVIDADE 2:** Abra o arquivo GLY.cif, referente ao aminoácido glicina utilizando o comando *Open* no menu *File* (figura 2).

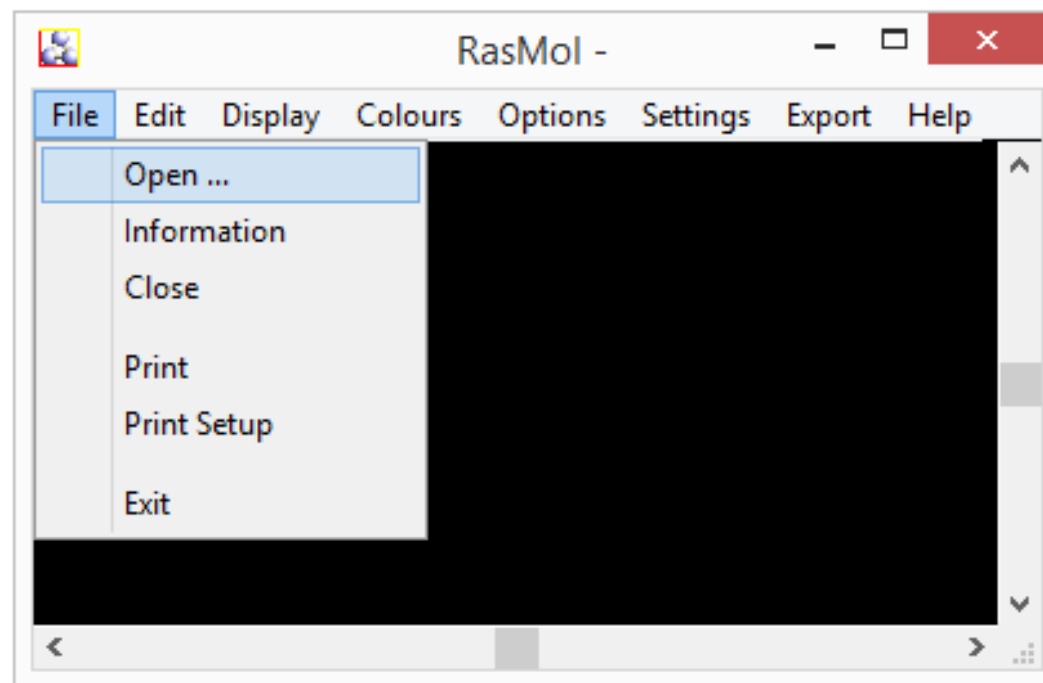


Figura 2 – Comando *Open*

Selecione o comando *Ball & Stick* no menu *Display* (figura 3).

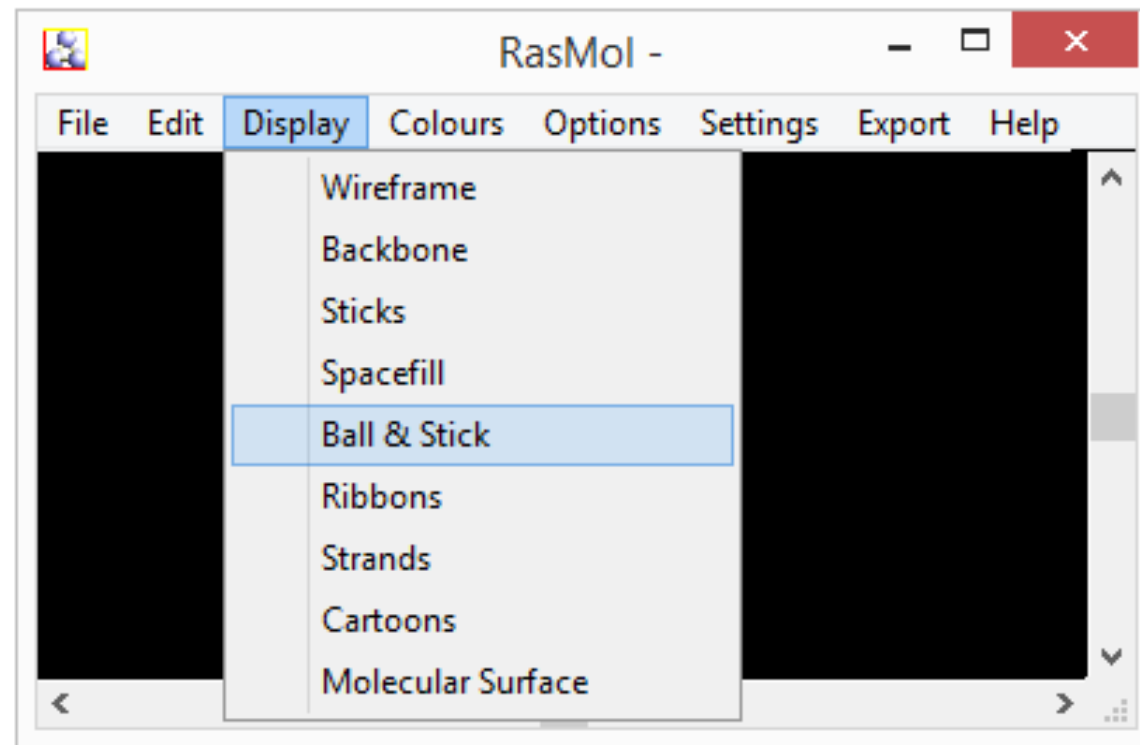


Figura 3 – Comando *Ball & Stick*

Selecione o comando *CPK* no menu *Colours* (figura 4).

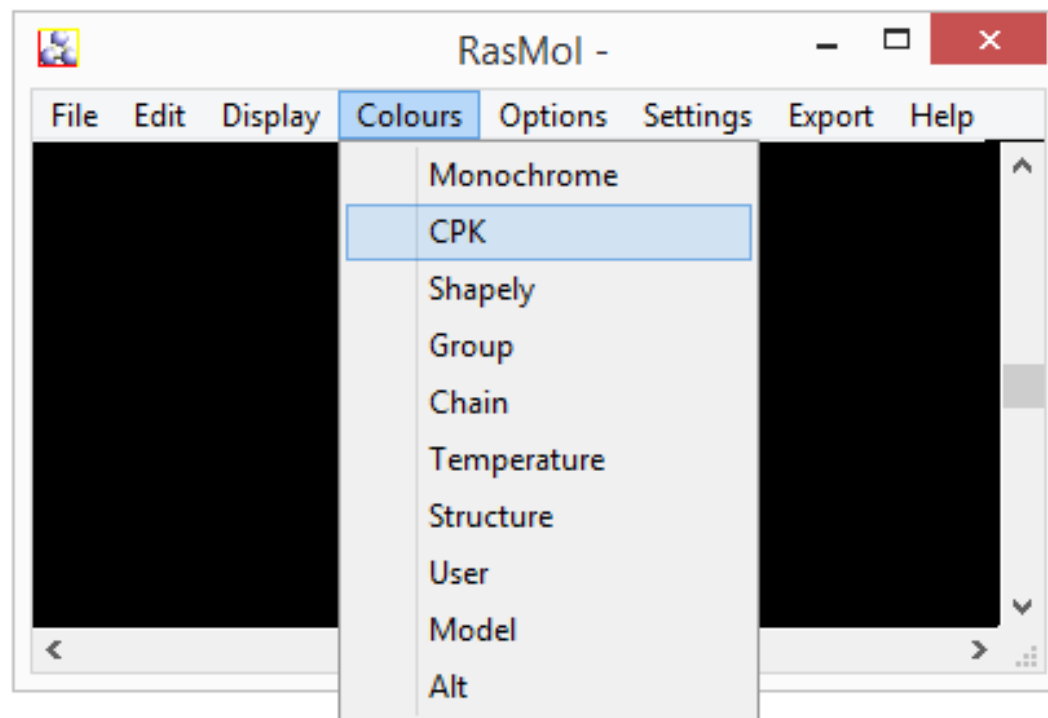


Figura 4 – Comando *CPK*

Observe o aminoácido glicina (figura 5) e localize os componentes do aminoácido: carbono central ou alfa, grupo carboxila ácido (COOH), grupo amino básico (NH<sub>2</sub>), átomo de hidrogênio e cadeia lateral.

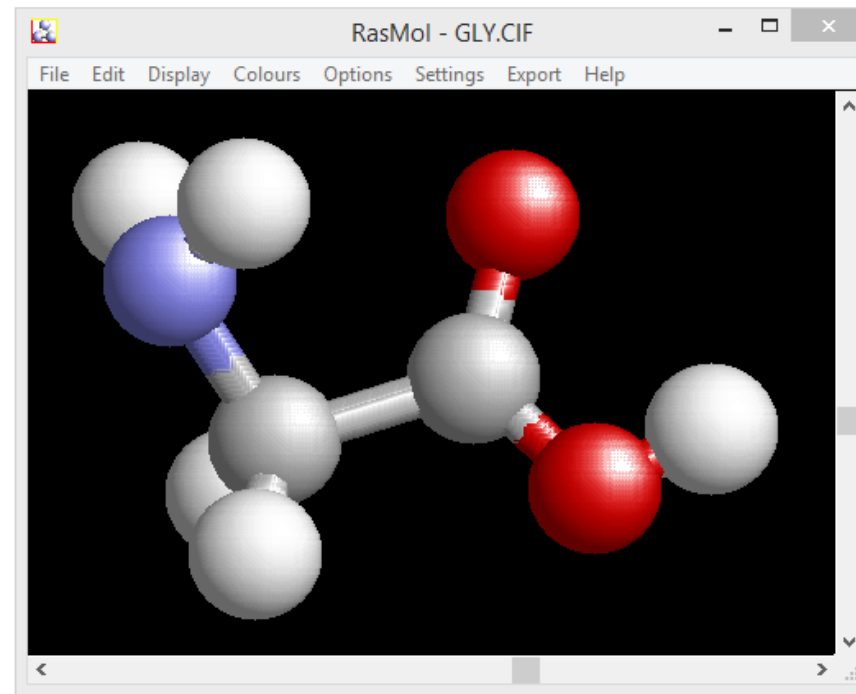


Figura 5 – Glicina

O aminoácido pode ser reposicionado e dimensionado na tela utilizando os seguintes comandos no mouse:

- *Rotate X, Y* (botão esquerdo do mouse)
- *Rotate Z* (botão direito do mouse + Shift)
- *Translate X, Y* (botão direito do mouse)
- *Zoom* (botão esquerdo do mouse + Shift)
- *Slab* (botão esquerdo do mouse + Ctrl)

## 4. Propriedades dos aminoácidos

Os aminoácidos podem ser localizados de acordo com as suas respectivas propriedades por meio do Comando *Select* na janela *RasMol Command Line* (quadro 1). O comando é dado por meio da sintaxe: *Select* {<expressão>}, que define a zona selecionada da estrutura. Todos os comandos subsequentes que manipulam a molécula ou modificam a sua cor ou a sua representação afetarão apenas a parte selecionada (Bernstein, Bernstein, 2012).

Quadro 1 – Expressões usadas no comando *Select* para selecionar aminoácidos de acordo com sua propriedade

Expressão	Átomos selecionados
<b>Seleção de acordo com o peso molecular do aminoácido</b>	
<i>large</i>	Átomos de aminoácidos de alto peso molecular (ARG, GLU, GLN, HIS, ILE, LEU, LYS, MET, PHE, TRP, TYR)
<i>medium</i>	Átomos de aminoácidos de peso molecular médio (ASN, ASP, CYS, PRO, THR, VAL)
<i>small</i>	Átomos de aminoácidos de baixo peso molecular (ALA, GLY, SER)
<b>Seleção de acordo com a posição preferencial do aminoácido</b>	
<i>buried</i>	Átomos de aminoácidos que tendem a se posicionar no interior da proteína, distantes do contato com moléculas de solventes (ALA, CYS, ILE, LEU, MET, PHE, TRP, VAL)
<i>surface</i>	Átomos de aminoácidos que tendem a se posicionar na superfície da molécula, em contato com moléculas de solventes (ARG, ASN, ASP, GLU, GLN, GLY, HIS, LYS, PRO, SER, THR, TYR)
<b>Seleção de acordo com a carga do aminoácido</b>	
<i>charged</i>	Átomos de aminoácidos com carga (ácidos ou básicos)
<i>hydrophobic</i>	Átomos de aminoácidos hidrofóbicos (ALA, LEU, VAL, ILE, PRO, PHE, MET, TRP)
<i>negative</i>	Átomos de aminoácidos de carga negativa (ASP, GLU)
<i>polar</i>	Átomos de aminoácidos polares ou hidrofílicos (ARG, ASN, ASP, CYS, GLU, GLN, HIS, LYS, SER, THR)
<i>positive</i>	Átomos de carga positiva (ARG, HIS, LYS)
<b>Seleção de acordo com o pH do aminoácido</b>	
<i>acidic</i>	Átomos de aminoácidos ácidos (ASP e GLU)
<i>basic</i>	Átomos de aminoácidos básicos (ARG, HIS, LYS)
<i>neutral</i>	Átomos de aminoácidos neutros (ALA, ASN, CYS, GLN, GLY, HIS, ILE, LEU, MET, PHE, PRO, SER, THR, TRP, TYR, VAL)
<b>Seleção de acordo com a estrutura</b>	
<i>acyclic</i>	Átomos de aminoácidos que não possuem anel de benzeno ou de estrutura relacionada (ALA, ARG, ASN, ASP, CYS, GLU, GLN, GLY, ILE, LEU, LYS, MET, SER, THR, VAL)
<i>aliphatic</i>	Átomos de aminoácidos alifáticos (ALA, GLY, ILE, LEU, VAL)
<i>aromatic</i>	Átomos de aminoácidos que contém anéis aromáticos (HIS, PHE, TRP, TYR)
<i>cyclic</i>	Átomos de aminoácidos que contém anel de benzeno ou de estrutura relacionada (HIS, PHE, PRO, TRP, TYR)

Observação: ALA: Alanina, ARG: Arginina, ASN: Asparagina, ASP: Aspartato, CYS: Cisteína, GLN: Glutamina, GLU: Ácido glutâmico, GLY: Glicina, HIS: Histidina, ILE: Isoleucina, LEU: Leucina, LYS: Lisina, MET: Metionina, PHE: Fenilalanina, PRO: Prolina, SER: Serina, THR: Treonina, TRP: Triptofano, TYR: Tirosina, VAL: Valina

Fonte: Adaptado de: Bernstein HJ, Bernstein FC. Manual RasMol 2.7.5. 2009 [citado em: 2018 nov. 15]. Disponível em: [http://www.rasmol.org/software/RasMol\\_2.7.5\\_Manual.html](http://www.rasmol.org/software/RasMol_2.7.5_Manual.html).

**ATIVIDADE 3:** Abra o arquivo 1TRZ.pdb, referente à insulina humana e utilize o comando *Ball & Stick* no menu *Display* e o comando *Monochrome* no menu *Colours* (figura 6).

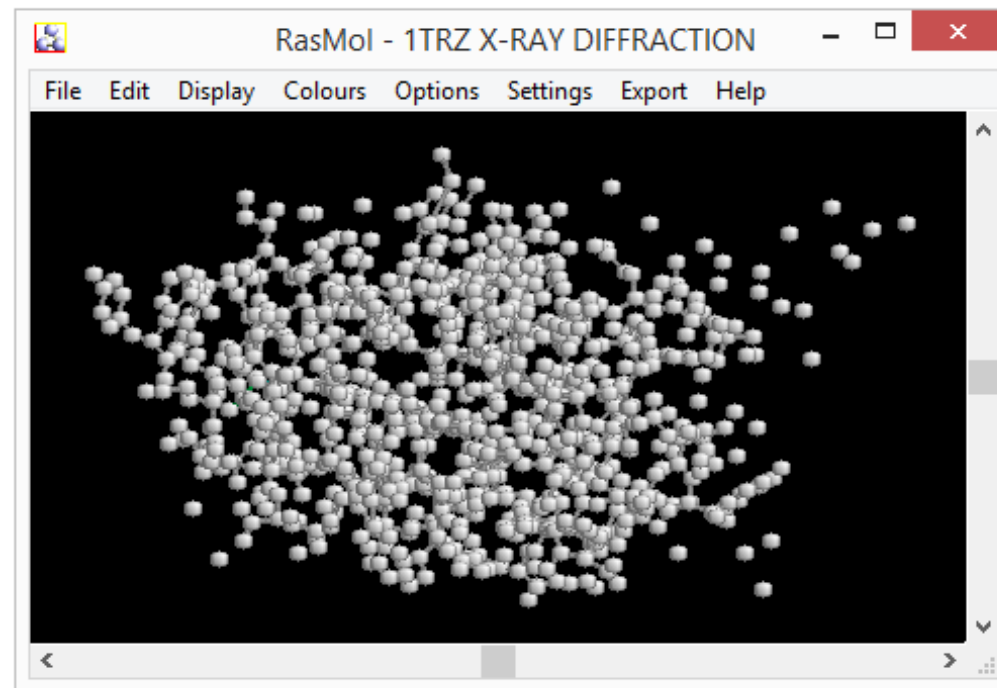
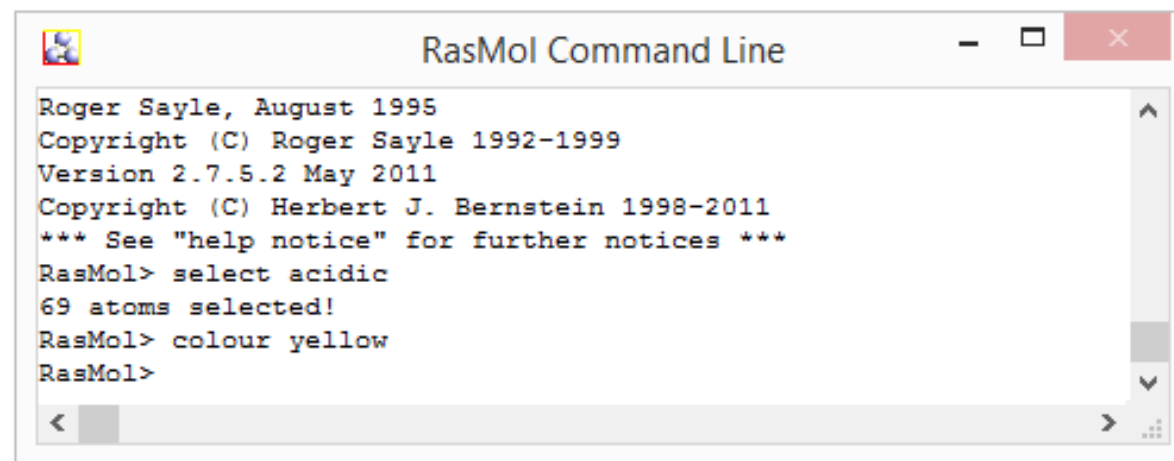
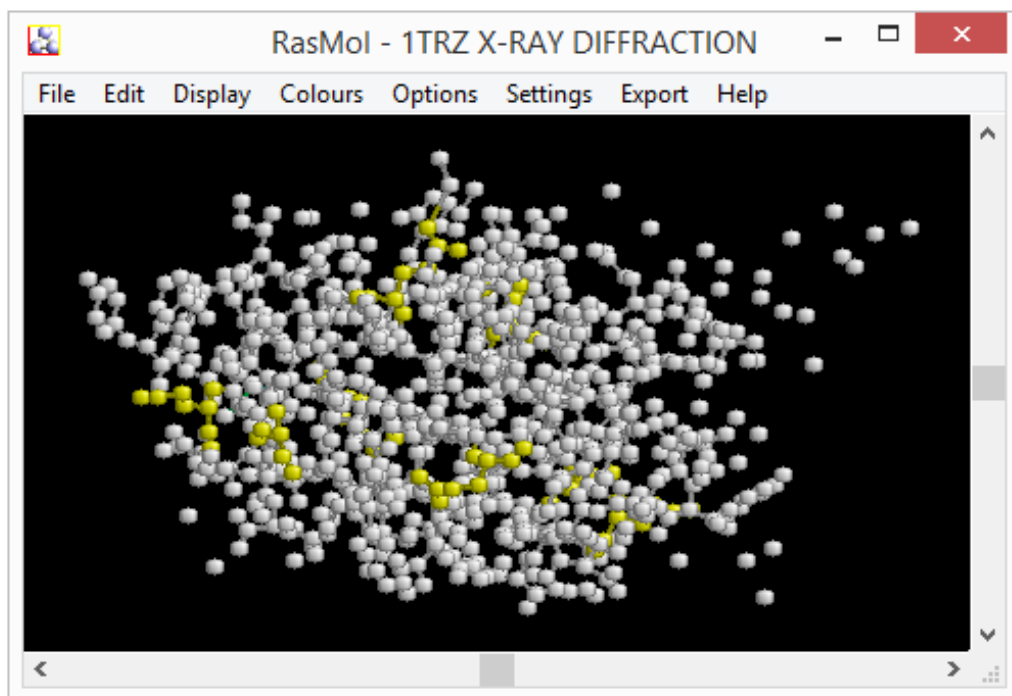


Figura 6 – Aspecto inicial do arquivo 1TRZ.pdb



Utilize os comandos de seleção e cor apresentados no quadro 2, começando pelos comandos *Select Acidic* e *Colour Yellow* (figura 7).











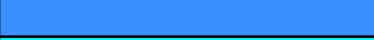





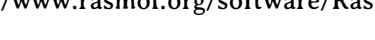


```
RasMol Command Line  
Roger Sayle, August 1995  
Copyright (C) Roger Sayle 1992-1999  
Version 2.7.5.2 May 2011  
Copyright (C) Herbert J. Bernstein 1998-2011  
*** See "help notice" for further notices ***  
RasMol> select acidic  
69 atoms selected!  
RasMol> colour yellow  
RasMol>
```

Figura 7 – Comandos *Select Acidic* e *Colour Yellow*

Usando o arquivo 1TRZ.pdb, programe a seleção de aminoácidos de acordo com o quadro 2, usando os comandos: *Select* <comando de seleção> <ENTER> e *Colour* <comando de cor> <ENTER> na janela *RasMol Command Line*.

Quadro 2 – Proposta para utilização do comando *Select* para selecionar aminoácidos de acordo com sua propriedade

Propriedade	Comando de seleção	Cor	Comando de cor	Amostra	Valores RGB
ácido	<i>acidic</i>	amarelo	<i>yellow</i>		[255,255,0]
básico	<i>basic</i>	vermelho	<i>red</i>		[255,0,0]
neutro	<i>neutral</i>	verde	<i>green</i>		[0,255,0]
carregado	<i>charged</i>	magenta	<i>magenta</i>		[255,0,255]
positivo	<i>positive</i>	marrom	<i>brown</i>		[175,117,89]
negativo	<i>negative</i>	rosa	<i>pink</i>		[255,101,117]
pequeno	<i>small</i>	vermelho alaranjado	<i>redorange</i>		[255,69,0]
médio	<i>medium</i>	azul	<i>blue</i>		[0,0,255]
grande	<i>large</i>	púrpura	<i>purple</i>		[160,32,240]
polar	<i>polar</i>	violeta	<i>violet</i>		[238,130,238]
hidrofóbico	<i>hydrophobic</i>	laranja	<i>orange</i>		[255,165,0]
profundo	<i>buried</i>	azul celeste	<i>skyblue</i>		[58,144,255]
superficial	<i>amino and not buried</i>	ciano	<i>cyan</i>		[0,255,255]
acíclico	<i>acyclic</i>	verde azulado	<i>greenblue</i>		[46,139,87]
cíclico	<i>cyclic</i>	verde mar	<i>seagreen</i>		[0,250,109]
alifático	<i>aliphatic</i>	rosa quente	<i>hotpink</i>		[255,0,101]
aromático	<i>aromatic</i>	ouro	<i>gold</i>		[255,156,0]

Fonte: Modificado de: Bernstein HJ, Bernstein FC. Manual RasMol 2.7.5. 2009 [citado em: 2018 nov. 15]. Disponível em: [http://www.rasmol.org/software/RasMol\\_2.7.5\\_Manual.html](http://www.rasmol.org/software/RasMol_2.7.5_Manual.html).

## 5. Estrutura primária das proteínas

A estrutura primária de uma proteína corresponde à sua sequência de aminoácidos que se mantêm unidos por ligações peptídicas. A importância de seu estudo também reside no fato de que muitas doenças genéticas são originadas por proteínas com sequências anormais de aminoácidos, causando prejuízo de sua função. Portanto, o conhecimento da estrutura primária de uma proteína permite que, nestas situações, seja feito o diagnóstico da doença (Champe, Harvey, Ferrier, 2009).

**ATIVIDADE 4:** Observe a estrutura primária de uma proteína por meio do arquivo 1TRZ.pdb, referente à insulina humana. Utilize o comando *Backbone* no menu *Display* e o comando *Shapely* no menu *Colours* (figura 8). O quadro 3 relaciona as cores indicadas para cada aminoácido no comando *Shapely*.



Figura 8 – Estrutura primária

Quadro 3 – Comando *Shapely*

Nome	Cor	Amostra	Valores RGB
Alanina	Verde médio		[140,255,140]
Fenilalanina	Cinza oliva		[83,76,66]
Isoleucina	Verde escuro		[0,76,0]
Leucina	Verde oliva		[69,94,69]
Metionina	Marrom claro		[184,160,66]
Prolina	Cinza escuro		[82,82,82]
Triptofano	Marrom oliva		[79,70,0]
Valina	Roxo claro		[255,140,255]
Asparagina	Salmão claro		[255,124,112]
Cisteína	Amarelo médio		[255,255,112]
Glicina	Branco		[255,255,255]
Glutamina	Salmão escuro		[255,76,76]
Serina	Laranja médio		[255,112,66]
Tirosina	Marrom médio		[140,112,76]
Treonina	Laranja escuro		[184,76,0]
Ácido aspártico	Rosa escuro		[160,0,66]
Ácido glutâmico	Marrom escuro		[102,0,0]
Arginina	Azul escuro		[0,0,124]
Lisina	Azul royal		[71,71,184]
Histidina	Azul médio		[112,112,255]

Fonte: Adaptado de: Bernstein HJ, Bernstein FC. Manual RasMol 2.7.5. 2009 [citado em: 2018 nov. 15]. Disponível em: [http://www.rasmol.org/software/RasMol\\_2.7.5\\_Manual.html](http://www.rasmol.org/software/RasMol_2.7.5_Manual.html).

## 6. Estrutura secundária das 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.

A alfa-hélice é uma estrutura em espiral estabilizada por ligações de hidrogênio paralelas ao eixo da hélice no interior do esqueleto de uma única cadeia polipeptídica. Contando a partir da extremidade N-terminal, o grupo C=O de cada resíduo de aminoácido se une por ligação de hidrogênio ao N-H do aminoácido colocado a quatro resíduos de distância adiante na sequência linear.

Na folha beta, as ligações de hidrogênio podem ser formadas entre diferentes partes de uma mesma cadeia dobrada sobre si (ligações intracadeia) ou entre diferentes cadeias (ligações intercadeia) (Campbell, Farrell, 2011; Taniguchi, 2010).

**ATIVIDADE 5:** Observe a estrutura secundária de uma proteína, utilizando o arquivo 5PEP.pdb, referente à pepsina suína. Use o comando *Cartoons* no menu *Display* e o comando *Structure* no menu *Colours*. Observe as alfa-hélices representadas como espirais em magenta e as fitas beta como setas em amarelo. As demais áreas da proteína aparecem como linhas brancas (figura 9).

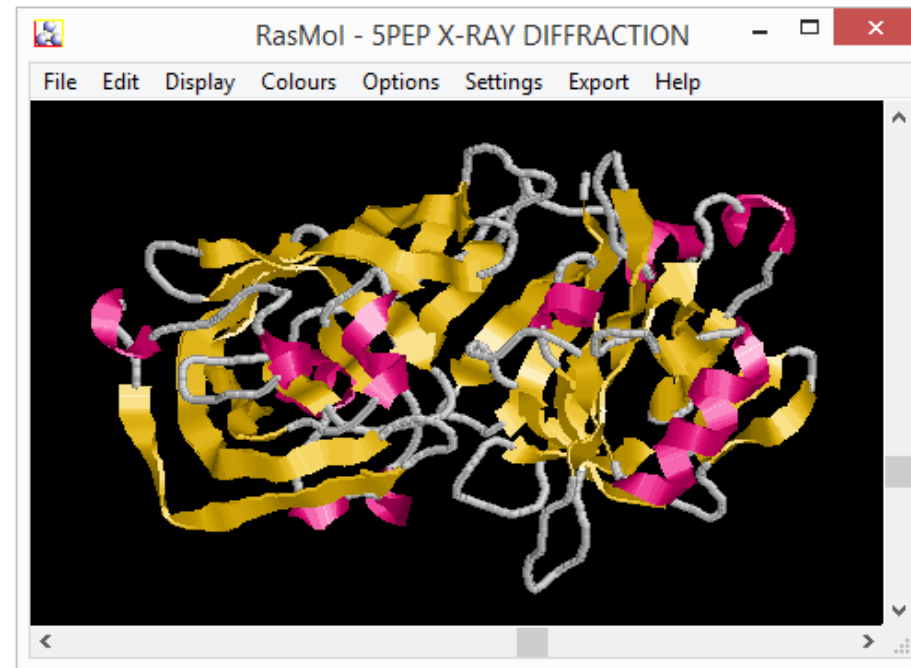


Figura 9 – Estrutura secundária

## 7. Estrutura terciária das proteínas

A estrutura terciária de uma proteína consiste na sua organização tridimensional. Fazem parte da estrutura terciária as conformações das cadeias laterais, as posições de qualquer grupo prostético e a disposição de alfa-hélices e folha beta em relação às outras (Campbell, Farrell, 2011; Schultz, Leibman, 2000). A estrutura terciária de uma proteína é estabilizada por interações entre os grupos funcionais das cadeias laterais do tipo: ligações dissulfeto covalentes, ligações de hidrogênio, pontes salinas e interações hidrofóbicas (Taniguchi, 2010). De acordo com a sua estrutura terciária, as proteínas podem ser classificadas como fibrosas ou globulares.



## 7.1. Proteínas fibrosas

As proteínas fibrosas possuem forma geral de um cilindro longo (tipo vareta ou bastão) (Campbell, Farrell, 2011). Alguns exemplos de proteínas fibrosas são o colágeno, a fibroína (presente na seda e teia de aranha), queratina e elastina. .

**ATIVIDADE 6:** Observe uma proteína fibrosa, por meio do arquivo 1BKV.pdb, referente a um peptídeo sintético, que contém uma região do colágeno tipo III humano. Utilize os comandos *Wireframe off* e *Trace 500* (na janela *Rasmol Command Line*) e o comando *Chain* no menu *Colours* (figura 10). O colágeno constitui uma família de proteínas fibrosas formadas por três cadeias polipeptídicas dispostas em tripla hélice, que variam em seu tamanho, chegando a até 1000 aminoácidos por cadeia. As três cadeias com disposição de hélice para a esquerda são enroladas umas nas outras, formando uma estrutura em super-hélice (Junqueira, Carneiro, 2012b; Kaushal, Elbein, Carver, 2010).

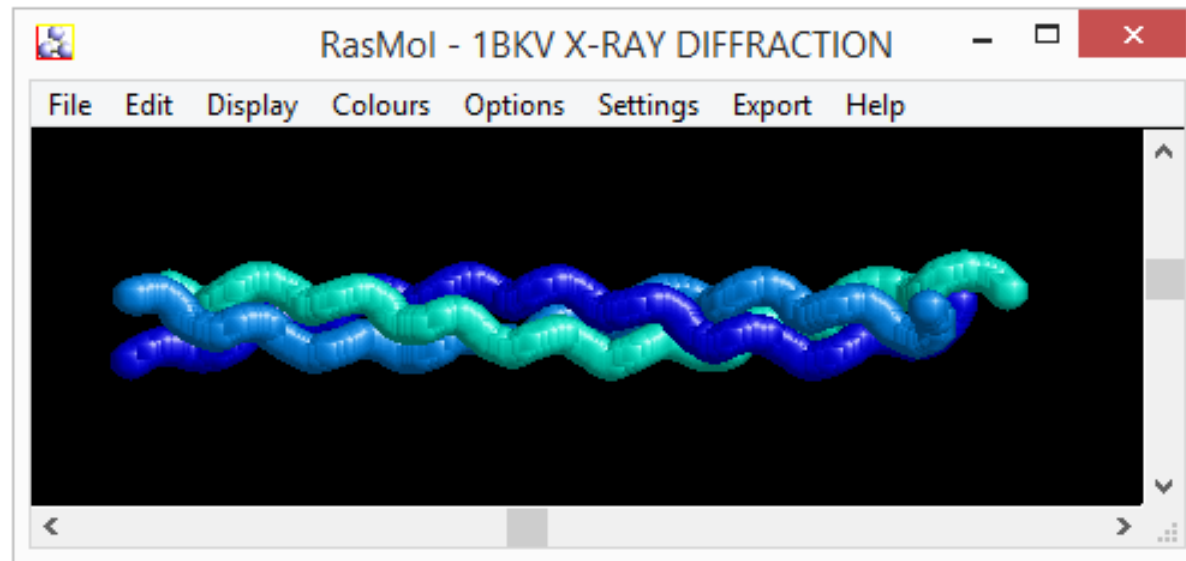


Figura 10 – Proteína fibrosa

## 7.2. Proteínas globulares

As proteínas globulares têm forma esferoidal, peso molecular variável, solubilidade em água relativamente alta e vários papéis funcionais como, por exemplo, catalizadores, transportadores, e como proteínas de controle para regulação de vias metabólicas e expressão gênica (Schultz, Leibman, 2000). São exemplos de proteínas globulares: porfirinas, metaloproteinases (endopeptidases e exopeptidases), entre outras.

**ATIVIDADE 7:** Observe uma proteína globular, utilizando o arquivo 1E7I.pdb, referente à albumina humana, por meio dos comandos *Spacefill* no menu *Display* e o comando *Chain* no menu *Colours* (figura 11). Observe alguns átomos de oxigênio em vermelho, pertencentes à moléculas de água junto à proteína.

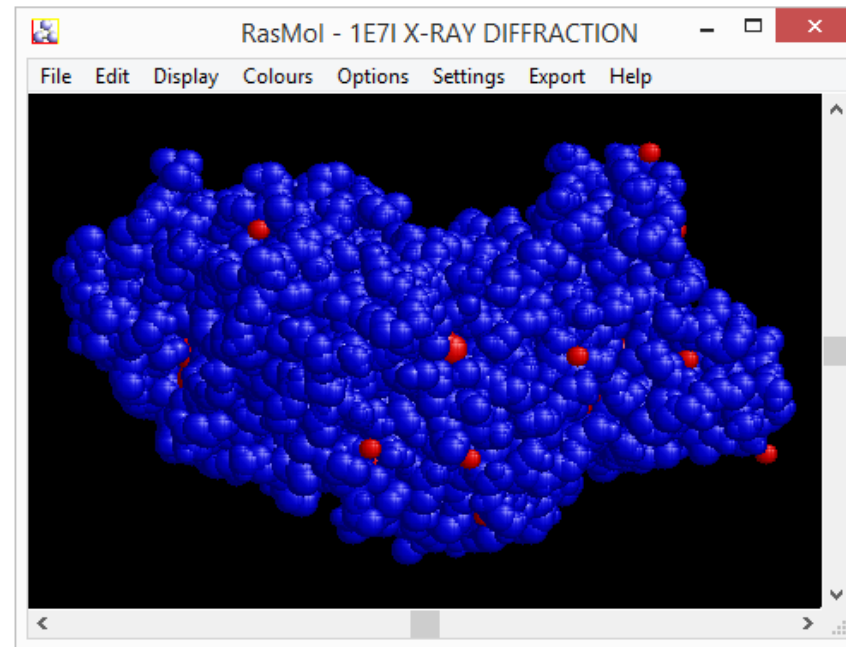


Figura 11 – Proteína globular

## 8. Estrutura quaternária das proteínas

A estrutura quaternária é determinada por 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 (Taniguchi, 2010). As proteínas que possuem estrutura quaternária podem ser **dímeros** (constituídas por duas cadeias polipeptídicas), **trímeros** (constituídas por três cadeias polipeptídicas), **tetrâmeros** (constituídas por quatro cadeias polipeptídicas) ou **oligômeros** (constituídas por um pequeno número de cadeias polipeptídicas) (Campbell, Farrell, 2011).

**ATIVIDADE 8:** Observe a estrutura quaternária de uma proteína por meio do arquivo 2HHB.pdb, referente à hemoglobina humana, utilizando os comandos *Cartoons* no menu *Display* e o comando *Chain* no menu *Colours* (figura 12).

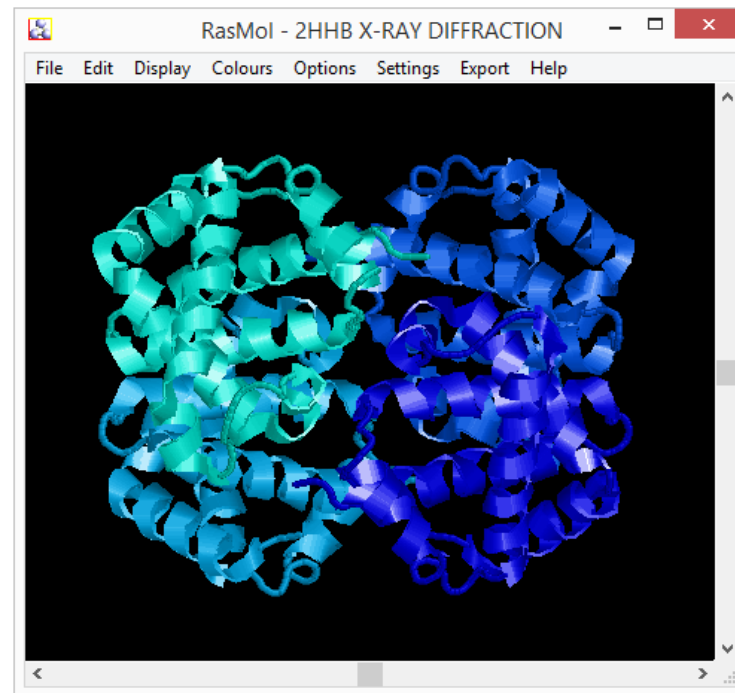


Figura 12 – Estrutura quaternária

# Referências

Bernstein HJ, Bernstein FC. Manual RasMol 2.7.5. 2009 [citado em: 2018 nov. 15]. Disponível em: [http://www.rasmol.org/software/RasMol\\_2.7.5\\_Manual.html](http://www.rasmol.org/software/RasMol_2.7.5_Manual.html).

Campbell MK, Farrell SO. A estrutura tridimensional das proteínas. In: \_\_\_\_\_. Bioquímica: volume 1, bioquímica básica. 1ª ed. São Paulo: Cengage Learning; 2011. p. 87-121.

Champe PC, Harvey RA, Ferrier DR. Estrutura das proteínas. In: \_\_\_\_\_. Bioquímica ilustrada. 4ª ed. Porto Alegre: Artmed; 2009. p. 13-24.

Hassunuma RM. Guia de comandos em software de simulação computacional de biomoléculas. 1ª ed. Bauru: Canal 6 Editora; 2017 [citado 2018 nov. 14]. 52p. Disponível em: <http://www.canal6livraria.com.br/pd-455621-guia-de-comandos-em-software-de-simulacao-computacional.html?ct=&p=1&s=1>. ISBN: 978-85-7917-420-9.

Hassunuma RM, Souza AR. Desenvolvimento de scripts em software de simulação computacional para visualização de biomoléculas. 1ª ed. São Paulo: Cultura Acadêmica; 2016 [citado 2018 nov. 14]. 408p. Disponível em: <http://www.culturaacademica.com.br/catalogo/desenvolvimento-de-scripts-em-software-de-simulacao-computacional-para-visualizacao-de-biomoleculas/>. ISBN: 9788579837364.

Junqueira LC, Carneiro J. Tecido conjuntivo. In: \_\_\_\_\_. Histologia básica. 11ª ed. Rio de Janeiro: Guanabara Koogan; 2008. 103-4.

Junqueira LC, Carneiro J. Bases moleculares da constituição celular. In: \_\_\_\_\_. *Biologia celular e molecular*. 9ª ed. Rio de Janeiro: Guanabara Koogan; 2012a. p. 41-66.

Junqueira LC, Carneiro J. *Biologia da interação célula-matriz extracelular*. In: \_\_\_\_\_. *Biologia Celular e Molecular*. 9ª ed. Rio de Janeiro: Guanabara Koogan; 2012b. p. 252.

Kaushal GP, Elbein AD, Carver WM. A matriz celular. In: Baynes JW, Dominiczak MH. *Bioquímica médica*. 3ª ed. Rio de Janeiro: Elsevier; 2010. p. 377-88.

Merka M. Searching for binding sites of metal atoms in proteins [Master thesis]. [Brno]: Masaryk University; 2009 [citado 2018 nov. 14]. Disponível em: [http://is.muni.cz/th/98961/fi\\_m/MgrThesis.pdf](http://is.muni.cz/th/98961/fi_m/MgrThesis.pdf).

Nelson DL, COX MM. Aminoácidos, peptídeos e proteínas. In: \_\_\_\_\_. *Lehninger: Princípios de Bioquímica*. 3ª ed. São Paulo: SARVIER; 2002. p. 89-122.

Schultz RM, Leibman MN. Proteínas I: Composição e estrutura. In: Devlin, TM. *Manual de Bioquímica com correlações clínicas*. 4ª ed. São Paulo: Editora Edgard Blücher Ltda.;2000. p. 19-70.

Taniguchi N. Aminoácidos e proteínas. In: Baynes JW, Dominiczak MH. *Bioquímica médica*. 3ª ed. Rio de Janeiro: Elsevier; 2010. p. 5-22.



**WWPDB. Protein data bank contents guide: atomic coordinate entry format description version 3.30. 2008 [citado 2018 nov. 14]. Disponível em: [ftp://ftp.wwpdb.org/pub/pdb/doc/format\\_descriptions/Format\\_v33\\_A4.pdf](ftp://ftp.wwpdb.org/pub/pdb/doc/format_descriptions/Format_v33_A4.pdf).**

Este livro foi desenvolvido como material de apoio para aulas práticas na área de Bioquímica e Bioinformática. Os autores apresentam uma sequência de atividades que podem ser desenvolvidas utilizando um programa computacional gratuito de simulação computacional para estudo de diferentes proteínas de interesse biológico. Este material pode ser utilizado por alunos e professores como um elemento de estudo complementar em sala de aula ou no desenvolvimento de atividades práticas laboratoriais.

ISBN 978-85-7917-536-7

