

Trabalho II

Bruno lochins Grisci

Universidade Federal do Rio Grande do Sul

bigrisci@inf.ufrgs.br

8 de junho de 2017

Sumário

1 Questão 1

2 Questão 2

Implementação

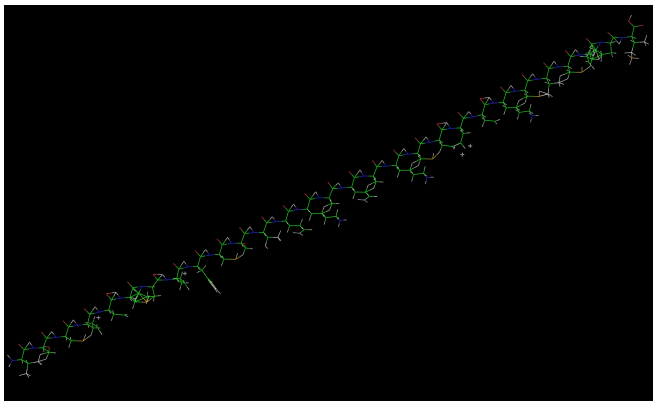
- Python;
- Numpy;
- Orientado a Objetos;
- Leitura do PDB: reaproveitada do Trabalho I

Formação de ligação peptídica

- Leitura dos arquivos .pdb dos aminoácidos;
- Tratar nomenclatura dos átomos;
- Átomos N dos aminoácidos são transladados para a origem;
- Para cada aminoácido:
 - Remove átomo H;
 - Move N para posição do átomo OC do aminoácido anterior;
 - Salva posição do átomo OC atual;
 - Remove átomos OC e HOC atuais.
- Primeiro e último aminoácidos são casos especiais;
- Correção de índices.

Estrutura resultante

Sequência: VSCEDCPEHCSTQKAQAKCDNDKCVCEPI



Cálculo dos ângulos

Átomos:

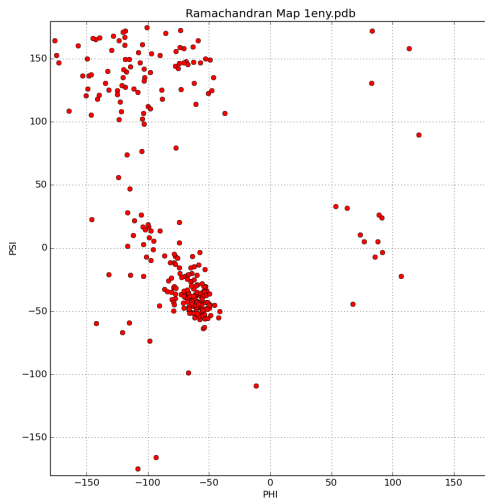
- PHI: C-1 - N - Ca - C
- PSI: N - Ca - C - N+1

Cálculo de ângulo diedro

Ângulos PHI - PSI (1ENY)

AMINO ÁCIDO	PHI	PSI
ALA	360.00	-112.08
GLY	121.15	89.96
LEU	-52.87	-30.57
LEU	-116.76	28.04
ASP	-50.50	122.54
GLY	62.56	31.90
...

Ramachandran Map



Fim