

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

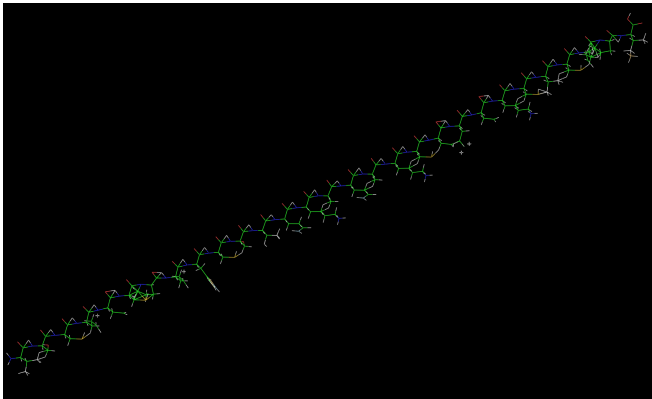
- Python;
- Numpy;
- Orientado a Objetos;
- Leitura do PDB: reaproveitada do Trabalho I

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:

- ϕ (phi): $C_{n-1} - N_n - C_{\alpha n} - C_n$
- ψ (psi): $N_n - C_{\alpha n} - C_n - N_{n+1}$

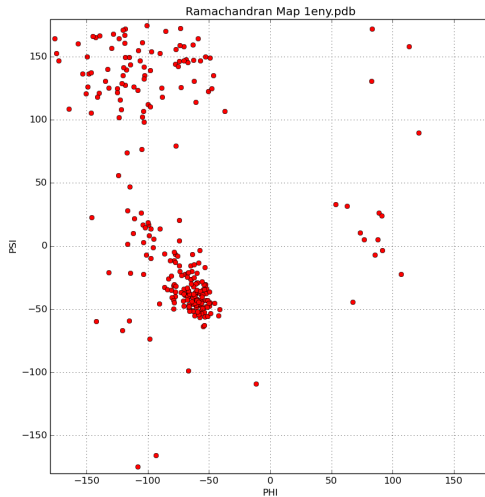
Cálculo de ângulo diedro

- P_1, P_2, P_3, P_4
- $\vec{b}_1 = P_2 - P_1, \vec{b}_2 = P_3 - P_2, \vec{b}_3 = P_4 - P_3$
- $\vec{n}_1 = \frac{\vec{b}_1 \times \vec{b}_2}{\|\vec{b}_1 \times \vec{b}_2\|}$
- $\vec{n}_2 = \frac{\vec{b}_2 \times \vec{b}_3}{\|\vec{b}_2 \times \vec{b}_3\|}$
- $\vec{m}_1 = \vec{n}_1 \times \frac{\vec{b}_2}{\|\vec{b}_2\|}$
- $x = \vec{n}_1 \cdot \vec{n}_2$
- $y = \vec{m}_1 \cdot \vec{n}_2$
- $\alpha = -\text{atan2}(y, x)$

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