

CURSO: Tecnologia em Análise e Desenvolvimento de Sistemas (ADS)
DISCIPLINA: Tópicos Especiais em Sistemas de Informação (TESI)
MÓDULO/SÉRIE: Módulo VI ANO: 2022 SEMESTRE: 2
PROFESSOR: Ricardo Martins Ramos

TRABALHO FINAL DE TESI - BIOINFORMÁTICA

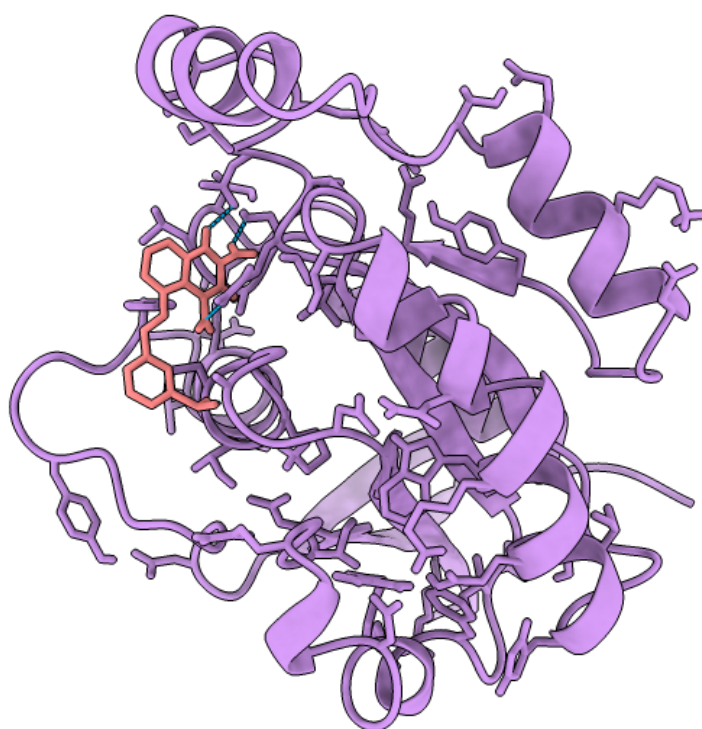
JOSÉ HILTON DA SILVA SANTOS
LUIS HENRIQUE ROCHA BUENO
MARCOS VINICIUS MACEDO

1. TABELA PARÂMETROS DE AFINIDADE MOLECULAR

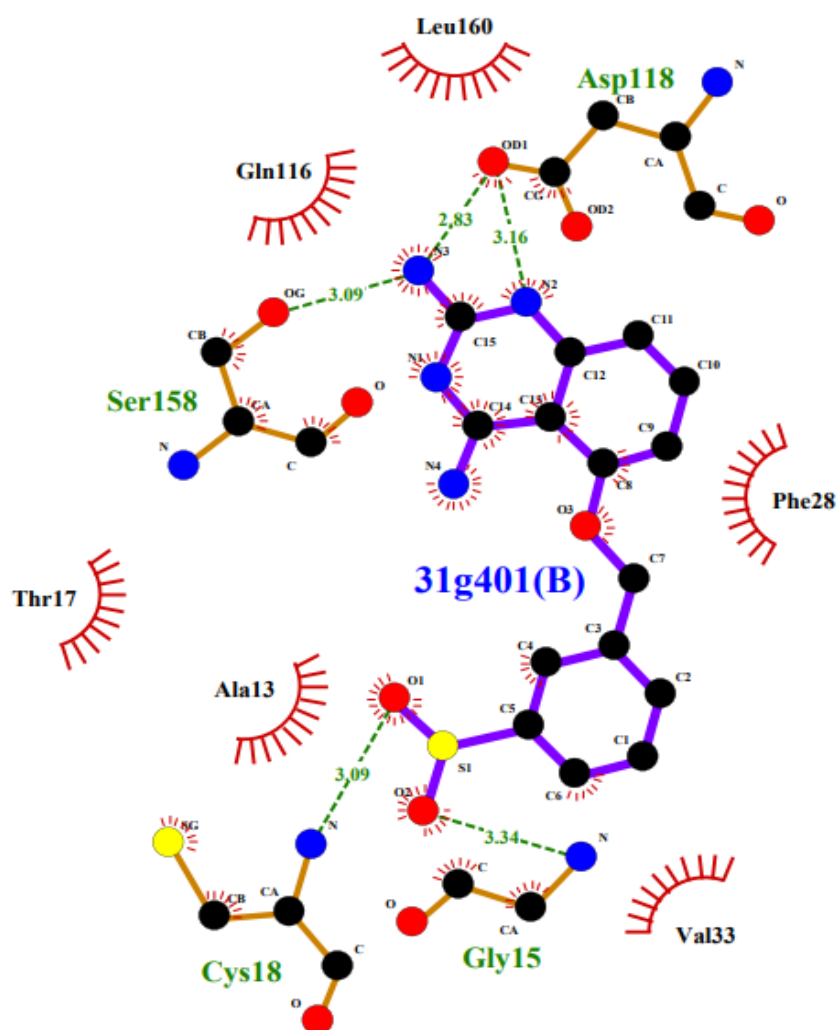
Resultados relativos à docagem molecular da proteína [4DID](#) (cadeia A) com ligantes [GDP](#), [0Q4](#), [31G](#) e [NAG](#).

Complexo (Proteína-ligante)	ΔG_{bind} (kcal/mol)	Aminoácidos que interagem por meio de ligações de hidrogênio (distância)	Aminoácidos que realizam interação hidrofóbica
4DID-GDP (controle)	-6.1	3.05 (Leu160 N – Gdp200 O6) 3.10 (Gly15 N – Gdp200 O3B) 3.15 (Ala159 N – Gdp200 O6) 3.21 (Cys18 N – Gdp200 O2B)	Thr17, Ala13, Val33, Phe28, Ser158, Asp118, Gln116
4DID-0Q4	-5.5	2.81 (Thr125 OG1 - 0q4125 N7) 2.98 (Gln116 OE1 - 0q4125 NH1) 3.09 (Ala13 O - 0q4125 NH1) 3.11 (Leu160 N - 0q4125 OE1) 3.17 (Gln116 OE1 - 0q4125 NH2) 3.22 (Ser124 OG - 0q4125 N7)	Val33, Cys18, Ser30, Phe28, Leu119, Ala159, Lys128, Val85, Leu129
4DID-31G	-6.6	2.83 (Asp118 OD1 - 31g401 N3) 3.09 (Cys18 N - 31g401 O1) 3.09 (Ser158 OG - 31g401 N3) 3.16 (Asp118 OD1 - 31g401 N2) 3.34 (Gly15 N - 31g401 O2)	Thr17, Ala13, Val33, Phe28, Gln116, Leu160
4DID-NAG	-5.4	2.96 (Leu160 N – Nag700 O4) 2.98 (Gln116 N – Nag700 O6) 3.00 (Ala159 N – Nag700 O6) 3.05 (Ala159 N – Nag700 O4) 3.07 (Gln116 NE2 – Nag700 O5) 3.11 (Asp118 OD1 – Nag700 O4) 3.15 (Ser158 OG – Nag700 O4)	Phe28, Leu119

2. IMAGEM DO COMPLEXO COM MELHOR ENERGIA DE LIGAÇÃO



Complexo 4DID-31G



Interações 4DID-31G