

# PROTEIN BUILDER

Leonardo Santos<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Biotecnologia - Bioinformática  
Universidade Federal do Rio Grande do Sul

Bioinformática Estrutural, 2017

# ROTEIRO

## PDB FILE

Leitura

## BUILDER

Dictionary

Peptide Bond

Dihedral Angles

# FRAGMENTAÇÃO

## LEITURA DE ÁTOMOS:

Para que apenas os átomos de interesse sejam utilizados:

- ▶ Apenas linhas que comecem com 'ATOM'
- ▶ Em caso de backbone e carbonos alfa:
  - ▶ Átomos: N, CA, C, O para backbone
  - ▶ CA para carbono alfa
  - ▶ N para carbono amina
  - ▶ C para carbono carboxila
- ▶ Retorna uma lista de vetores, onde cada vetor representa um átomo

# MONTA DICIONÁRIO DE AMINOÁCIDOS

- ▶ Input: 20 arquivos PDB, um para cada aminoácido
- ▶ Output: Dic[AA]:" aa
  - ▶ AA: código de letra correspondente. (Ex: A,C,P,M.
  - ▶ aa: átomos correspondentes correspondente.

# PEPTIDE BOND

- ▶ Input: sequência de aminoácidos
- ▶ Output: arquivo .pbd com a cadeia de aminoácidos correspondentes
  - ▶ Retorna os aminoácidos apenas alinhados, sem rotação

# ENCADEAMENTO

- ▶ Primeiro aminoácido: é definido como o ponto de referência
- ▶ Próximos aminoácidos:
  - ▶ O átomo N do aminoácido  $n$  é posicionado no mesmo lugar que o átomo C da carboxila do aminoácido  $n-1$
  - ▶ Os átomos C e H da carboxila são removidos do aminoácido  $n-1$
  - ▶ O deslocamento do átomo N do aminoácido  $n$  é calculado e aplicado aos outros átomos

# VSCEDCPEHCSTQKAQAKCDNDKCVCEPI

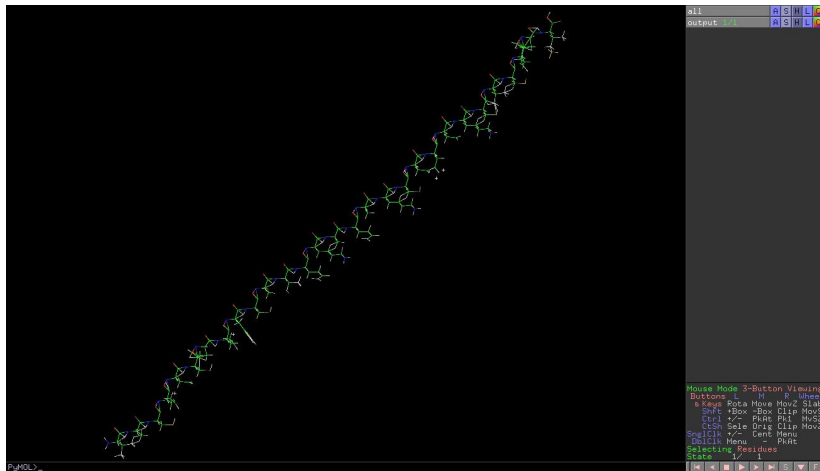


FIGURA: Criada no PyMol

# INICIALIZAÇÃO

- ▶ Input: arquivo .pdb
- ▶ Output1: arquivo .txt com o aminoácido, ângulo Phi e Psi
- ▶ Output2: mapa de Ramachandran



## CÁLCULO DE ÂNGULO

- ▶ Input PSI:  $[N_n, CA_n, C_n, N_{n+1}]$
- ▶ Input PHI:  $[C_{n-1}, N_n, CA_n, C_n]$ 
  - ▶ Cada átomo é representado por um vetor  $[P_x, P_y, P_z]$
- ▶ Calculo de distancia entre átomos
  - ▶ Para cada dupla de átomos é calculado um vetor  $b_{1-2}, b_{2-3}, b_{3-4}$

$$n1 = \frac{b1 \times b2}{\| b1 \times b2 \|}, n2 = \frac{b2 \times b3}{\| b2 \times b3 \|} \rightarrow m1 = n1 \times \frac{b2}{\| b2 \|} \quad (1)$$

# CÁLCULO DE ÂNGULO

$$x = n1 \times n2, y = m1 \times n2 \rightarrow \phi/\psi = \arctan(y, x) \quad (2)$$

# CÁLCULO DE ÂNGULO

- ▶ Primeiro átomo:
  - ▶ PHI: 360
  - ▶ PSI: cálculo de ângulo
- ▶ Último átomo:
  - ▶ PHI: cálculo de ângulo
  - ▶ PSI: 360

1ENY

	Amino	Phi	Psi
1	ALA	360.00	-112.88
2	GLY	121.15	89.96
3	LEU	-52.87	-30.57
4	LEU	-116.76	28.04
5	ASP	-50.50	122.54
6	GLY	62.56	31.90
7	LYS	-104.61	161.35
8	ARG	-121.79	108.41
9	ILE	-117.51	139.94
10	LEU	-103.11	142.15
11	VAL	-131.07	125.37
12	SER	-118.69	167.21
13	GLY	88.85	26.31
14	ILE	-88.61	125.11
15	ILE	-120.71	-66.95
16	THR	-108.27	-174.61
17	ASP	-90.12	13.53
18	SER	-116.40	1.58
19	SER	-62.04	147.16
20	ILE	-68.13	-36.81
21	ALA	-59.30	-35.67
22	PHE	-56.59	-47.60
23	MET	-70.47	-33.94
24	ILE	-62.81	-46.12
25	ALA	-55.14	-50.78
26	ARG	-57.62	-56.43
27	VAL	-56.05	-38.97
28	ALA	-56.45	-51.64
29	GLN	-55.94	-44.08
30	GLU	-64.93	-15.68
31	GLN	-97.58	13.93
32	GLY	91.35	-3.22
33	ALA	-70.71	158.03
34	GLN	-122.70	115.82
35	LEU	-100.93	174.79
36	VAL	-148.34	136.78
37	LEU	-115.07	149.69
38	THR	-110.33	149.00
39	GLY	-142.49	165.18
40	PHE	-98.31	-73.64
41	ASP	-131.00	-21.00
42	ARG	-104.94	76.72
43	LEU	-69.82	-38.77
44	ARG	-66.96	-35.24
45	LEU	-63.83	-50.91
46	ILE	-62.22	-38.13
47	GLN	-54.83	-63.72
48	ARG	-45.69	-45.30
49	ILE	-63.04	-51.53
50	THR	-58.57	-13.13
51	ASP	-73.69	-20.13
52	ARG	-76.52	-11.51

FIGURA: Output AA-PHI-PSI

# 1ENY

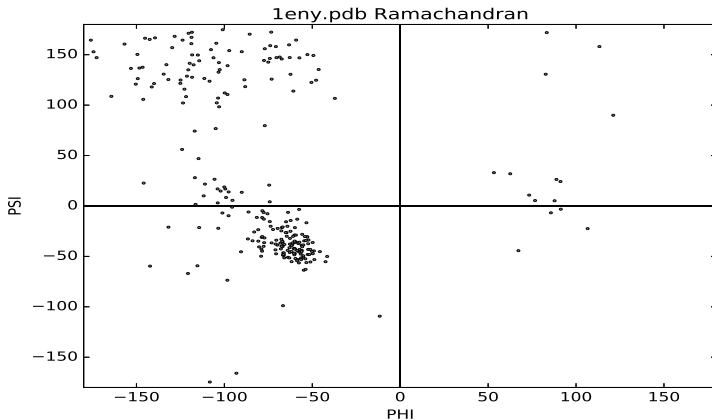


FIGURA: 1ENY Ramachandran's map