

Programa de Interações Intermoleculares

Aluna: Raquel Lopes Costa

Professor: Laurent Emmanuel Dardenne

Laboratório Nacional de Computação Científica - LNCC

cep: 25651-075, Petrópolis, RJ

e-mail: quelopes@lncc.br - Tel: (24) 2233-6135

20 de dezembro de 2010

1 Introdução: Interações Intermoleculares

Os átomos de elementos quimicamente reativos procuram atingir a combinação estável de ter elétrons pareados em suas camadas externas. Eles atingem a estabilidade por compartilhar elétrons com outros átomos ou por ganhar ou perder um ou mais elétrons a partir das suas camadas mais externas. Quando compartilham elétrons, os átomos são ligados e tais ligações criam associações estáveis de átomos chamadas de moléculas.

Quando duas moléculas se aproximam, ocorre uma interação de seus campos magnéticos surgindo uma força entre elas chamadas de força intermolecular. Essa força varia em intensidade e depende dos tipos de átomos presentes na estrutura molecular. Dentre as forças intermoleculares, as ligações de hidrogênio, pontes salinas, Van der Waals e o efeito hidrofóbico são as mais relevantes.

As **Ligações Covalentes** ocorrem através do compartilhamento de elétrons na camada externa do átomo gerando estabilidade no último orbital. Esta ligação é forte e estável.

Já as **Ligações Coulombianas** são interações entre carga carga ou carga íon ou íon íon. São consideradas de longo alcance.

As interações do tipo **Ligações de Van der Waals** ocorrem entre átomos e moléculas que possuem um componente atrativo independente da existência de carga líquida e de dipolos permanentes. Podem ser de três tipos: entre dipolos permanentes, entre um dipolo permanente e um induzido, entre dipolos mutuamente induzidos (forças de London ou dispersão).

Ao contrário do que se pensa, o **Efeito Hidrofóbico** não ocorre devido a repulsões entre a água e as moléculas apolares. Ela resulta numa tendência dos átomos interagirem mais favoravelmente entre si do que com a água. A ausência de pontes de hidrogênio entre moléculas apolares e a água provoca a

formação de estruturas ordenadas de moléculas ao redor da molécula apolar.

Ligações do tipo **Pontes de Hidrogênio** ocorre quando dois átomos eletronegativos competem pelo mesmo átomo de hidrogênio. O átomo de Hidrogênio está covalentemente ligado a um dos átomos (doador) e interage com o outro (aceptor). A distância desta ligação depende da eletronegatividade do aceptor e do doador. Quanto maior a eletronegatividade, menor é a distância.

Dados experimentais adquiridos com técnicas de cristalografia de raio X ou ressonância magnética nuclear permitem medir a distância entre os átomos de uma determinada molécula. Desta forma, a partir de coordenadas espaciais dos átomos, é possível saber quantas e quais interações moleculares estão ocorrendo entre proteínas, ligantes e solventes.

Com este propósito foi desenvolvido o programa de interações intermoleculares. Os dados das coordenadas foram obtidos de moléculas determinadas experimentalmente e depositadas no PDB (<http://www.pdb.org/pdb/home/home.do>).

2 Estrutura do Programa

O programa foi construído utilizando a linguagem de programação C. Contém os seguintes arquivos:

- **interacoes.c**
- **interacoes.h**
- **interacoes_main.c**
- **parametros.txt**
- **aaCarga.txt**

Os arquivos (parametros.txt e aaCarga.txt) são arquivos de configuração dos parâmetros de distâncias intermoleculares e dos aminoácidos carregados respectivamente.

Para compilar o programa digite **make** no terminal. Para rodar digite **./Interacoes**, em seguida entrar com o nome do arquivo PDB. Por exemplo, 1POP.pdb

2.1 Critério no Cálculo das Distâncias

Foi utilizada a distância euclidiana (tridimensional) entre as coordenadas $X1, Y1, Z1$ de um átomo e as coordenadas $X2, Y2, Z2$ do átomo de interação definidos como:

$$\sqrt{(X1 - X2)^2 + (Y1 - Y2)^2 + (Z1 - Z2)^2}$$

Sendo Ångströms (Å) como unidade de distância utilizada entre os átomos ($1 \times 10^{-10}m$).

2.2 Critérios na identificação dos tipos de interações

Para identificar o tipo de interação entre átomos da proteína, do ligante e do solvente, foi utilizado as seguintes distâncias com os intervalos:

pt Hidrogênio	3.1	0.4
pt salina	6.0	0.5
covalente	2.0	0.0
efeito hidrofóbico	4.75	0.3
Van der Waals	4.1	0.3

Para modificar os valores acima, o usuário deve acessar o arquivo **parametros.txt** obedecendo o seguinte critério:

linha 1: pontes de hidrogênio
linha 2: coulombinas
linha 3: covalente
linha 4: hidrofobicos
linha 5: van der waals

Efeito Hidrofóbico

Foram considerados apenas a interação entre átomos de C-C e C-S.

Interações Eletrostáticas, ponte salina

Nesta interação foram considerados apenas os aminoácidos carregados (HIS, LYS, ASP, ARG, GLU) e nestes aminoácidos, apenas os átomos carregados. Para marcar os átomos, foi utilizada a nomenclatura do pdb:

HIS: ND1 e ND2. Pka: 6.5.

LYS: NZ. Pka: 10.

ASP: OD1 e OD2. Pka: 4.4.

ARG: NH1 e NH2. Pka: 12.

GLU: OE1 e OE2. Pka: 4.4.

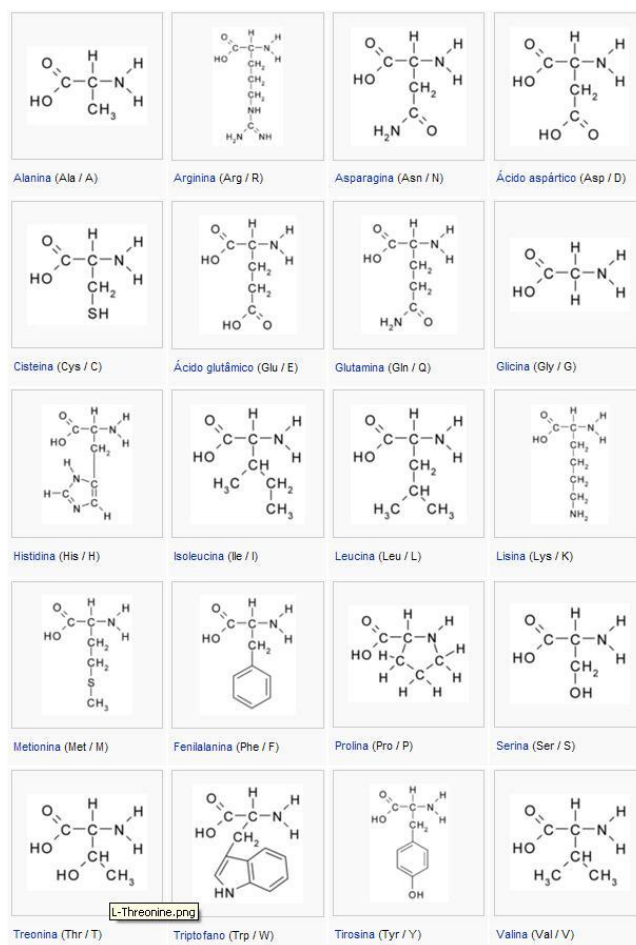


Figura 1: Aminoácidos.

2.3 Funções do Programa

```
1  /* Funcoes Print */
2  void print_vetStruct(PDB* vet, int qtd);
3  void print_matDist(float** matrix, int qt1, int qt2);
4  void print_parametros(IMOL* parametros);
5
6  /* Funcoes de alocação */
7  float** mat_alocMatDist(int lines, int cols);
8
9  /* Funcoes de preenchimento*/
10 void fill_vetProt(FILE* Arqpdb, PDB* vet);
11 void fill_vetSol(FILE* Arqpdb, PDB* vet);
12 void fill_vetLig(FILE* Arqpdb, PDB* vet);
13 void preencheMat(float** matDist, PDB* vet1, PDB* vet2, int qt1, int
    qt2);
14 void preencheParametros(IMOL* parametros, FILE* parFile);
15
16 /* Funcoes busca */
17 int match(char* line);
18 void filtraArqPDB(FILE* pdb, int* vet);
19 void procuraLigSolProt(FILE* saida, IMOL* parametros, float**
    matDist, float**
20 matDist2, int lines, int cols, int linesProt, PDB* vet1, PDB* vet2,
    PDB* vet3);
21 void procura(FILE* saida, IMOL* parametros, float** matDist, int
    lines, int
22 cols, PDB* vet1, PDB* vet2);
23 void verificaPSulfeto(FILE* saida, float** matProt, PDB* vetProt,
    int qtd);
24
25 /* Demais funcoes */
26 PDB preencheAux(char* line, PDB* vet, int v);
```

2.4 Tipos estruturados

PDB: armazena informações contidas no arquivo PDB como coordenadas, número do átomo, molécula na qual está inserido, etc.

```
typedef struct pdb_dados{
    char tipo[8];
    float x;
    float y;
    float z;
    int num;
    char aa[4];
    char atm;
    int id;
    char atm_tipo[4];
} PDB;
```

IMOL: armazena informações contidas no arquivo de parâmetros.

```
typedef struct imol{
    double ptH;
    double ptH_var;
    double coval;
    double coval_var;
    double hidrofo;
    double hidrofo_var;
    double eletro;
    double eletro_var;
    double vdw;
    double vdw_var;
    int His; /* 0 nao carregado, 1 carregado */
    int Arg;
    int Lys;
    int Glu;
    int Asp;
} IMOL;
```

2.5 Saída de arquivo

O programa gera um relatório com as interações encontradas a partir do arquivo pdb fornecido. O relatório pode ser visualizado no arquivo saida.txt.

3 Resultados experimentais

Na construção do programa, foi utilizado os arquivos do PDB 1POP.pdb (papaína) e 1HSG.pdb para testes do programa. Foi obtido os seguintes resultados para 1POP.pdb:

```
Laboratorio Nacional de Computacao Cientifica
Aluna: Raquel Lopes Costa

*****
*****Relatorio das Iteracoes Inter Moleculares *****
*****

Arquivo do PDB: =====> 1POP.pdb <=====

=====
===== Entre a Proteína [1] e o Ligante [2] =====
=====

***  LIGAÇÕES COVALENTES ***
-----
[1]-[2]  Distância  Res[1]  Res[2]    Atm[1]  Atm[2]    nPDB[1]  nPDB[2]
-----
N--C    1.332979    LEU    ACE          N        C        2055     2052
Quantidade de Ligacoes Covalentes: 1

***  LIGACOES HIDROFOBICAS ***
-----
[1]-[2]  Distância  Res[1]  Res[2]    Atm[1]  Atm[2]    nPDB[1]  nPDB[2]
-----
```

C---C	4.909939	LYS	MOH	CB	C	109	2091
C---C	4.488043	LYS	MOH	CG	C	110	2091
C---C	4.587848	LYS	MOH	CD	C	111	2091
C---C	4.923383	THR	MOH	CA	C	138	2127
C---C	4.456648	PRO	MOH	CG	C	151	2127
C---C	4.999223	SER	MOH	C	C	204	2160
C---C	4.607026	CYS	MOH	C	C	212	2160
C---C	5.039409	ILE	MOH	C	C	367	2097
C---C	4.807193	ARG	MOH	CA	C	375	2097
C---C	4.975669	ARG	MOH	CZ	C	570	2133
C---C	4.938135	TYR	ACE	CD1	C	640	2052
C---C	4.780566	TYR	ACE	CZ	C	644	2052
C---C	4.582090	PRO	MOH	CG	C	653	2130
C---C	5.016245	TRP	MOH	CG	C	660	2130
C---C	4.687535	TYR	MOH	CZ	C	751	2133
C---C	4.481012	TYR	MOH	CE2	C	791	2148
C---C	4.862727	SER	MOH	CA	C	959	2103
C---C	4.496645	SER	MOH	CB	C	962	2103
C---C	4.778820	ARG	MOH	C	C	968	2103
C---C	4.892059	ARG	MOH	CB	C	970	2103
C---C	4.928908	PRO	MOH	CA	C	1012	2103
C---C	4.712444	TYR	MOH	CG	C	1023	2103
C---C	4.796391	TYR	MOH	CD1	C	1024	2103
C---C	4.559675	ALA	MOH	CB	C	1036	2148
C---C	4.568440	ARG	MOH	C	C	1090	2118
C---C	4.799113	ARG	MOH	CB	C	1092	2118
C---C	4.839882	ARG	MOH	CB	C	1092	2142
C---C	4.598256	ARG	MOH	CD	C	1094	2118
C---C	4.787184	GLN	MOH	C	C	1107	2118
C---C	4.917709	TYR	MOH	CA	C	1145	2154
C---C	4.946791	TYR	MOH	CE1	C	1218	2100
C---C	4.797819	SER	MOH	CA	C	1225	2109
C---C	5.002621	SER	MOH	CB	C	1228	2109
C---C	4.820835	ASN	MOH	CG	C	1252	2100
C---C	4.921557	GLN	MOH	CG	C	1263	2109
C---C	4.907308	ASP	MOH	CA	C	1361	2124
C---C	5.029144	LEU	MOH	CA	C	1394	2115
C---C	4.910625	LEU	MOH	C	C	1395	2115
C---C	4.698177	LEU	MOH	CG	C	1398	2115
C---C	4.783443	LEU	MOH	CD1	C	1399	2115
C---C	4.592505	TYR	MOH	C	C	1404	2094
C---C	4.795418	TYR	MOH	CD1	C	1408	2094
C---C	4.510409	ARG	MOH	CA	C	1417	2094
C---C	4.834296	ARG	MOH	C	C	1418	2094
C---C	4.853559	ARG	MOH	CG	C	1421	2094
C---C	4.833182	ARG	MOH	CG	C	1421	2115
C---C	4.913188	GLY	MOH	CA	C	1434	2139
C---C	4.966744	GLY	MOH	C	C	1435	2139
C---C	4.922045	GLY	MOH	CA	C	1439	2139
C---C	4.797364	PHE	MOH	CE1	C	1460	2124
S---C	4.634147	CYS	MOH	SG	C	1489	2106
C---C	4.832582	HIS	MOH	CB	C	1541	2157
C---C	4.857828	TRP	MOH	CH2	C	1712	2157
C---C	4.799353	GLU	MOH	CG	C	1760	2139
C---C	4.859682	VAL	MOH	C	C	1919	2106
C---C	4.663554	VAL	MOH	CB	C	1921	2106
C---C	4.879426	PHE	MOH	CD1	C	1991	2130
C---C	4.907293	TYR	MOH	CG	C	2002	2109
C---C	4.697169	TYR	MOH	CE1	C	2005	2109
C---C	4.560477	TYR	MOH	CE2	C	2006	2142
C---C	4.771034	LEU	ACE	CB	CH3	2059	2054
C---C	4.510017	LEU	ACE	CG	C	2060	2052
C---C	4.643237	LEU	MOH	CG	C	2069	2130
C---C	4.718033	ARG	MOH	CA	C	2074	2157
C---C	4.705649	ARG	MOH	CB	C	2077	2160
C---C	4.678125	ARG	MOH	CD	C	2079	2160

Quantidade de Ligacoes Hidrofobicas: 66

*** LIGACOES ELETROSTATICAS ***

[1]-[2]	Distância	Res[1]	Res[2]	Atm[1]	Atm[2]	nPDB[1]	nPDB[2]
N---O	5.747845	ARG	MOH	NH1	O	571	2134
N---O	6.034275	ARG	MOH	NH2	O	572	2134

N---O	5.573813	HIS	MOH	ND1	O	775	2104
N---O	6.316338	ARG	MOH	NH2	O	1098	2143
N---O	5.806964	ARG	MOH	NH1	O	1425	2116
N---O	5.773295	ARG	MOH	NH1	O	2082	2158
N---O	5.639421	ARG	MOH	NH1	O	2082	2161
N---O	5.521498	ARG	MOH	NH2	O	2083	2158

Quantidade de Ligacoes eletrostaticas: 8

*** LIGACOES DE VAN DER WAALS ***

[1]-[2]	Distância	Res [1]	Res [2]	Atm [1]	Atm [2]	nPDB [1]	nPDB [2]
C---C	4.360411	ILE	MOH	CG2	C	7	2100
C---O	4.379727	LYS	MOH	CG	O	110	2092
C---C	3.907438	PRO	MOH	CD	C	152	2127
C---O	4.210859	PRO	MOH	CD	O	152	2128
O---C	3.880637	SER	MOH	O	C	205	2160
N---C	3.808095	GLY	MOH	N	C	217	2160
N---O	4.396575	GLY	MOH	N	O	217	2161
C---C	3.806303	GLY	MOH	CA	C	218	2160
C---O	4.192025	GLY	MOH	CA	O	218	2161
C---O	4.378218	ILE	MOH	CD1	O	341	2152
C---O	4.372453	ILE	MOH	CG2	O	349	2146
O---C	4.170944	ILE	MOH	O	C	368	2097
C---O	4.185278	ILE	MOH	CG2	O	371	2098
C---C	4.372669	ILE	MOH	CG2	C	371	2151
C---C	4.215947	ARG	MOH	CD	C	380	2097
C---C	4.121606	ARG	MOH	CZ	C	382	2097
C---O	3.876167	ARG	MOH	CZ	O	382	2098
C---C	4.191686	ARG	MOH	CZ	C	382	2151
C---O	4.175453	ARG	MOH	CZ	O	382	2152
N---C	3.948116	ARG	MOH	NH1	C	383	2151
N---O	4.297238	ARG	MOH	NH1	O	383	2152
C---C	4.214483	THR	MOH	CB	C	395	2145
O---C	3.805700	THR	MOH	OG1	C	396	2145
O---O	4.284033	THR	MOH	OG1	O	396	2146
C---C	4.344166	THR	MOH	CG2	C	397	2145
C---C	4.243956	ASN	MOH	CB	C	409	2145
C---C	4.070337	ASN	MOH	CG	C	410	2145
C---C	4.257011	LEU	MOH	CD2	C	423	2127
C---O	3.998037	LEU	MOH	CD2	O	423	2128
O---C	4.086876	CYS	MOH	O	C	609	2160
C---O	3.950771	TYR	ACE	CD1	O	640	2053
C---C	4.126306	TYR	ACE	CE1	C	642	2052
C---O	4.301176	TYR	ACE	CZ	O	644	2053
N---O	4.207588	PRO	MOH	N	O	648	2131
C---O	3.849230	PRO	MOH	CB	O	652	2131
C---C	3.949367	PRO	MOH	CD	C	654	2130
N---O	4.191940	TRP	MOH	N	O	655	2131
C---O	4.397926	TRP	MOH	CG	O	660	2131
N---C	4.065567	TRP	MOH	NE1	C	663	2130
N---O	4.106051	TRP	MOH	NE1	O	663	2131
C---C	4.099584	LEU	MOH	CD2	C	713	2133
C---C	3.849573	GLN	MOH	CD	C	735	2133
C---C	4.109011	TYR	MOH	CE2	C	750	2133
C---O	3.983382	TYR	MOH	CE2	O	750	2134
O---O	4.205395	TYR	MOH	CZ	O	751	2134
O---C	4.243111	TYR	MOH	OH	C	752	2133
C---C	4.114239	HIS	MOH	CE1	C	777	2103
C---O	3.868910	TYR	MOH	CE2	O	791	2149
C---C	4.272918	TYR	MOH	CZ	C	792	2148
C---C	3.920365	SER	MOH	C	C	960	2103
N---C	4.105179	ARG	MOH	N	C	966	2103
C---C	3.911529	ARG	MOH	CA	C	967	2103
C---C	4.233943	GLY	MOH	C	C	1008	2103
C---O	4.248015	GLY	MOH	C	O	1008	2104
C---O	4.180325	PRO	MOH	CA	O	1012	2104
C---O	4.351766	PRO	MOH	C	O	1013	2104
N---O	3.882654	TYR	MOH	N	O	1018	2104
C---O	3.921299	TYR	MOH	CG	O	1023	2104
C---C	4.196248	TYR	MOH	CD2	C	1025	2103
C---O	4.335915	TYR	MOH	CE1	O	1026	2104
C---C	3.850310	TYR	MOH	CZ	C	1028	2103
O---C	3.984526	TYR	MOH	OH	C	1029	2103

O---O	4.250249	TYR	MOH	OH	O	1029	2104
C---C	4.156658	ALA	MOH	CA	C	1033	2148
C---C	4.394925	ALA	MOH	C	C	1034	2148
C---O	4.189119	ARG	MOH	CG	O	1093	2119
C---C	4.126647	ARG	MOH	CG	C	1093	2142
C---O	4.002398	ARG	MOH	CG	O	1093	2143
C---C	4.341980	GLN	MOH	CA	C	1106	2118
C---O	4.015632	GLN	MOH	C	O	1107	2119
O---C	4.185386	GLN	MOH	O	C	1108	2118
C---C	4.014042	GLN	MOH	CB	C	1109	2118
C---O	3.964683	GLN	MOH	CB	O	1109	2119
C---C	4.288229	TYR	MOH	C	C	1146	2154
C---C	4.164584	TYR	MOH	CB	C	1148	2154
C---O	4.148609	SER	MOH	C	O	1226	2110
O---O	3.861682	SER	MOH	O	O	1227	2110
C---O	4.241907	ALA	MOH	C	O	1243	2101
C---C	4.291045	ASN	MOH	C	C	1249	2151
O---O	3.842623	ASN	MOH	O	O	1250	2152
C---C	3.897557	ASN	MOH	CB	C	1251	2109
C---O	3.832325	ASN	MOH	CB	O	1251	2110
C---C	3.963153	ASN	MOH	CB	C	1251	2151
C---O	3.989942	ASN	MOH	CB	O	1251	2152
C---O	3.866875	ASN	MOH	CG	O	1252	2101
C---C	4.127765	ASN	MOH	CG	C	1252	2109
C---O	4.214909	ASN	MOH	CG	O	1252	2110
C---C	4.353126	ASN	MOH	CG	C	1252	2151
C---C	4.359942	GLN	MOH	CD	C	1264	2109
C---O	4.360077	GLN	MOH	CD	O	1264	2152
C---C	4.163531	VAL	MOH	CG1	C	1306	2130
C---O	4.302669	VAL	MOH	CG1	O	1306	2131
C---C	4.100639	ASP	MOH	CB	C	1364	2124
C---O	4.108221	ASP	MOH	CB	O	1364	2125
C---C	4.173900	ASP	MOH	CG	C	1365	2124
C---O	4.093993	ASP	MOH	CG	O	1365	2125
O---O	4.389468	LEU	MOH	O	O	1396	2095
O---C	3.991254	LEU	MOH	O	C	1396	2115
C---C	4.168866	LEU	MOH	CB	C	1397	2115
C---C	4.357490	LEU	MOH	CD2	C	1400	2115
C---C	4.331422	TYR	MOH	CA	C	1403	2094
C---O	4.277946	TYR	MOH	CB	O	1406	2095
C---O	4.088713	TYR	MOH	CG	O	1407	2095
C---O	4.329185	TYR	MOH	CE1	O	1410	2095
C---C	4.368153	ARG	MOH	CB	C	1420	2094
C---C	4.243046	ARG	MOH	CD	C	1422	2115
C---O	4.238501	GLY	MOH	CA	O	1434	2095
C---O	4.198910	GLY	MOH	CA	O	1434	2140
C---O	4.196957	GLY	MOH	C	O	1435	2095
C---O	3.888448	GLY	MOH	C	O	1435	2140
O---C	4.247230	GLY	MOH	O	C	1436	2094
N---C	4.191512	GLY	MOH	N	C	1438	2139
C---C	4.239203	VAL	MOH	CG2	C	1470	2112
C---C	4.288802	GLY	MOH	C	C	1474	2124
C---C	4.003346	PRO	MOH	CD	C	1483	2124
C---O	4.073059	CYS	MOH	C	O	1486	2107
S---O	3.839907	CYS	MOH	SG	O	1489	2107
O---O	4.140256	GLY	MOH	O	O	1494	2107
O---O	4.004892	ASP	MOH	O	O	1531	2158
C---O	4.004953	HIS	MOH	CB	O	1541	2158
C---C	4.351974	HIS	MOH	CG	C	1542	2157
C---O	3.958170	HIS	MOH	CG	O	1542	2158
C---C	3.978500	HIS	MOH	CE1	C	1545	2157
C---O	4.353955	HIS	MOH	CE1	O	1545	2158
N---O	4.136030	ASN	MOH	ND2	O	1622	2113
N---C	3.932865	TRP	MOH	NE1	C	1707	2157
C---C	4.168857	TRP	MOH	CE2	C	1708	2157
C---O	4.248455	TRP	MOH	CZ2	O	1710	2158
C---C	4.268522	GLU	MOH	CD	C	1761	2139
C---O	3.865512	GLU	MOH	CD	O	1761	2140
C---O	4.081675	ARG	MOH	CZ	O	1812	2137
N---O	3.990325	ARG	MOH	NH1	O	1813	2137
N---C	4.075826	ARG	MOH	NH2	C	1814	2139
C---C	3.998235	LYS	MOH	CD	C	1836	2112
C---O	4.233214	LYS	MOH	CD	O	1836	2113
C---C	3.967149	LYS	MOH	CE	C	1837	2112

C---O	4.181985	LYS	MOH	CE	O	1837	2113
N---C	4.149200	ASN	MOH	ND2	C	1886	2106
N---O	4.258729	ASN	MOH	ND2	O	1886	2107
C---C	3.979641	SER	MOH	CB	C	1894	2154
O---C	4.093109	SER	MOH	OG	C	1895	2154
O---O	4.371409	SER	MOH	OG	O	1895	2155
O---O	3.807511	GLY	MOH	O	O	1915	2107
C---C	4.272365	VAL	MOH	CA	C	1918	2106
C---O	4.059578	VAL	MOH	CB	O	1921	2107
N---C	4.247298	CYS	MOH	N	C	1925	2106
C---O	3.818766	CYS	MOH	CA	O	1926	2107
C---C	3.805123	SER	MOH	CB	C	1973	2130
C---O	4.225466	SER	MOH	CB	O	1973	2131
O---C	4.204957	SER	MOH	OG	C	1974	2130
C---O	3.861267	PHE	MOH	CD1	O	1991	2131
C---C	4.323421	PHE	MOH	CE1	C	1993	2130
C---C	4.079003	TYR	MOH	CD2	C	2004	2109
C---O	4.121668	TYR	MOH	CD2	O	2004	2110
C---O	4.165347	TYR	MOH	CE1	O	2005	2110
C---O	3.909275	TYR	MOH	CE2	O	2006	2143
C---C	3.841996	TYR	MOH	CZ	C	2007	2109
C---C	4.368592	TYR	MOH	CZ	C	2007	2142
C---O	4.166102	TYR	MOH	CZ	O	2007	2143
O---C	4.055258	TYR	MOH	OH	C	2008	2109
O---O	4.107195	TYR	MOH	OH	O	2008	2110
C---C	4.351040	LEU	ACE	C	CH3	2057	2054
O---O	3.942630	LEU	ACE	O	O	2058	2053
O---C	4.305287	LEU	ACE	O	CH3	2058	2054
C---O	4.293619	LEU	ACE	CB	O	2059	2053
C---C	4.184710	LEU	ACE	CD1	C	2061	2052
N---C	4.007631	LEU	ACE	N	C	2064	2052

.
.
.

Quantidade de Van der Waals: 178

*** LIGACOES DE HIDROGENIO ***

[1]-[2]	Distância	Res[1]	Res[2]	Atm[1]	Atm[2]	nPDB[1]	nPDB[2]
N---O	2.828792	ARG	MOH	NH1	O	383	2098
N---O	3.275969	ARG	MOH	NH2	O	384	2152
O---O	3.229171	ASN	MOH	OD1	O	411	2146
O---O	3.311713	ASN	MOH	OD1	O	431	2146
O---O	3.456269	TYR	MOH	OH	O	752	2134
O---O	2.887616	TYR	MOH	OH	O	793	2149
O---O	3.371658	GLY	MOH	O	O	1009	2104
N---O	2.875666	GLN	MOH	N	O	1105	2119
O---O	3.300373	GLN	MOH	O	O	1108	2119
O---O	3.216232	ASP	MOH	OD2	O	1367	2125
N---O	3.137828	GLY	MOH	N	O	1433	2095
O---O	3.290790	GLY	MOH	O	O	1436	2095
N---O	2.919517	GLY	MOH	N	O	1438	2140
O---O	3.183701	CYS	MOH	O	O	1487	2107
N---O	3.474584	HIS	MOH	ND1	O	1543	2158
O---O	2.732234	GLU	MOH	OE2	O	1763	2140
N---O	3.243240	ARG	MOH	NH2	O	1814	2137
N---O	3.243282	ARG	MOH	NH2	O	1814	2140
N---O	2.870275	CYS	MOH	N	O	1925	2107
O---O	3.445537	TYR	MOH	OH	O	2008	2143
N---O	3.281643	ARG	MOH	NE	O	2080	2161

Quantidade de Pontes de Hidrogenio: 21

--- RESUMO ---

Ligacoes Eletrostaticas: 8
 Ligacoes Hidrofobicas: 66
 Ligacoes Covalentes: 1
 Ligacoes de Hidrogenio: 21
 Ligacoes de Van der Waals: 178

=====

===== Entre o Ligante [1] e o Solvente [2] =====

=====

*** LIGACOES DE HIDROGENIO ***

[1]-[2]	Distância	Res[1]	Res[2]	Atm[1]	Atm[2]	nPDB[1]	nPDB[2]
O---O	3.441377	MOH	HOH	O	O	2095	2397
O---O	2.853256	MOH	HOH	O	O	2107	2319
O---O	2.992954	MOH	HOH	O	O	2110	2406
O---O	2.933131	MOH	HOH	O	O	2113	2526
O---O	3.470499	MOH	HOH	O	O	2125	2397
O---O	3.003673	MOH	HOH	O	O	2128	2514
O---O	3.338379	MOH	HOH	O	O	2131	2247
O---O	2.800486	MOH	HOH	O	O	2137	2577
O---O	2.710969	MOH	HOH	O	O	2140	2538
O---O	3.218268	MOH	HOH	O	O	2140	2577
O---O	3.046229	MOH	HOH	O	O	2146	2286
O---O	2.792804	MOH	HOH	O	O	2152	2535
O---O	3.076681	MOH	HOH	O	O	2158	2646
O---O	3.153550	MOH	HOH	O	O	2161	2685

Quantidade de Pontes de Hidrogenio: 14

--- RESUMO ---

Ligacoes Eletrostaticas: 0
 Ligacoes Hidrofobicas: 0
 Ligacoes Covalentes: 0
 Ligacoes de Hidrogenio: 14
 Ligacoes de Van der Waals: 0

 =====
 ===== Entre Ligante [1] Solvente [2] e Proteina [3] =====
 =====

*** LIGACOES DE HIDROGENIO ***

[1]-[2]-[3]	d[1-2]	d[2-3]	r[1]	r[2]	r[3]	a[1]	a[2]	a[3]	n[1]	n[2]	n[3]
O---O---O	3.44	3.21	MOH	HOH	ASP	O	O	O	2095	2397	1363
O---O---N	2.85	2.92	MOH	HOH	ASN	O	O	ND2	2107	2319	1886
O---O---O	2.85	3.12	MOH	HOH	GLY	O	O	O	2107	2319	1915
O---O---O	2.99	2.90	MOH	HOH	SER	O	O	OG	2110	2406	1229
O---O---O	2.99	3.41	MOH	HOH	TYR	O	O	OH	2110	2406	2008
O---O---N	2.93	3.02	MOH	HOH	ASN	O	O	ND2	2113	2526	1622
O---O---O	3.47	3.21	MOH	HOH	ASP	O	O	O	2125	2397	1363
O---O---O	3.00	2.97	MOH	HOH	VAL	O	O	O	2128	2514	132
O---O---O	3.34	3.00	MOH	HOH	SER	O	O	O	2131	2247	1288
O---O---O	3.34	2.94	MOH	HOH	SER	O	O	O	2131	2247	1972
O---O---O	3.05	2.70	MOH	HOH	TYR	O	O	OH	2146	2286	459
O---O---O	3.05	2.82	MOH	HOH	ALA	O	O	O	2146	2286	1035
O---O---N	3.08	3.45	MOH	HOH	ALA	O	O	N	2158	2646	1336
O---O---O	3.08	3.34	MOH	HOH	ASP	O	O	OD1	2158	2646	1534
O---O---N	3.15	3.32	MOH	HOH	ASN	O	O	ND2	2161	2685	620

Quantidade de Pontes de Hidrogenio: 15

 =====
 ===== Pontes Dissulfeto Proteina [1] Proteina [1] =====
 =====

*** PONTES DISSULFETO ***

[1]-[1]	Distância	Res[1]	Res[1]	Atm[1]	Atm[1]	nPDB[1]	nPDB[1]
S---S	2.035378	CYS	CYS	SG	SG	215	611
S---S	2.011083	CYS	CYS	SG	SG	534	939
S---S	2.014923	CYS	CYS	SG	SG	1489	1930

Quantidade de Pontes Dissulfeto: 3