



1. Estudar o artigo do SKEMPI:

- <https://doi.org/10.1093/bioinformatics/bty635>
- <https://life.bsc.es/pid/skempi2>

2. Após se familiarizar com os dados do SKEMPI, construir uma planilha com as seguintes informações:

pdb_id	código PDB do complexo proteína-proteína;
partner1	id(s) da(s) cadeia(s) referente(s) à porção do receptor;
partner2	id(s) da(s) cadeia(s) referente(s) à porção ligante;
partner_mut	id da cadeia que contém a mutação;
resnum	posição do resíduo que foi mutado por alanina;
$\Delta G_{wt}$	variação de energia livre do complexo sem mutações (selvagem);
$\Delta G_{mut}$	variação de energia livre do complexo c/ mutação;
$\Delta \Delta G$	diferença entre a variação de energia livre do complexo selvagem e mutado;
hotspot	1, se $\Delta \Delta G \geq 2.5$ , caso contrário, definir como 0.

Obs.: Resgatar apenas mutações por alanina.

**Exemplo (hipotético):**

pdb_id	partner1	partner2	partner_mut	resnum	$\Delta G_{wt}$	$\Delta G_{mut}$	$\Delta \Delta G$	hotspot
1xgu	C	AB	A	58	-11.5	-8	3.5	1

Descrição: O arquivo pdb 1XGU contém 3 cadeias, sendo a cadeia C referente à porção do receptor, e as cadeias A e B à porção ligante (anticorpo). Somado a isso, o SKEMPI contém dado experimental de mutação por alanina na cadeia A, especificamente no resíduo de posição 58. A afinidade de ligação deste complexo em sua forma selvagem é -10.0 kcal/mol, enquanto a mutada é -5.0 kcal/mol. Portanto, a diferença na variação de energia livre é de 5.0 kcal/mol. A mutação por alanina nesta posição desestabiliza a interação proteína-proteína, portanto, o resíduo 58 da cadeia A é um hotspot.