

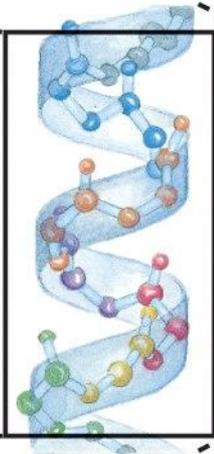
Níveis de organização das proteínas

Primary structure



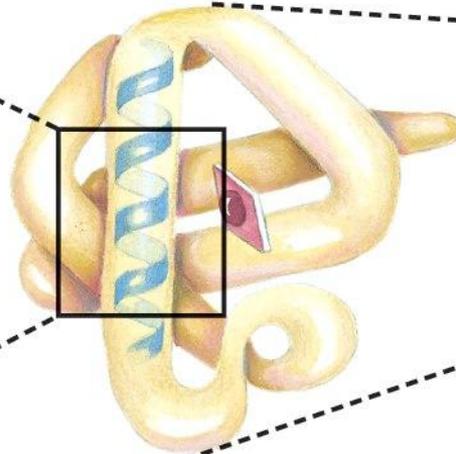
Amino acid residues

Secondary structure



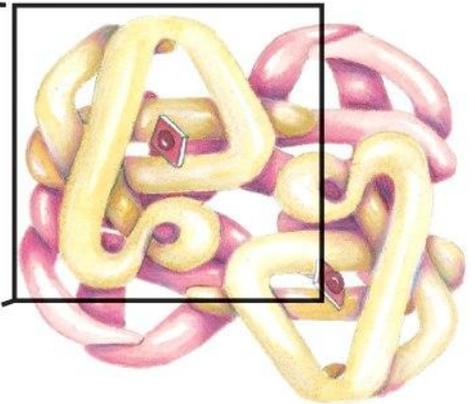
α Helix

Tertiary structure



Polypeptide chain

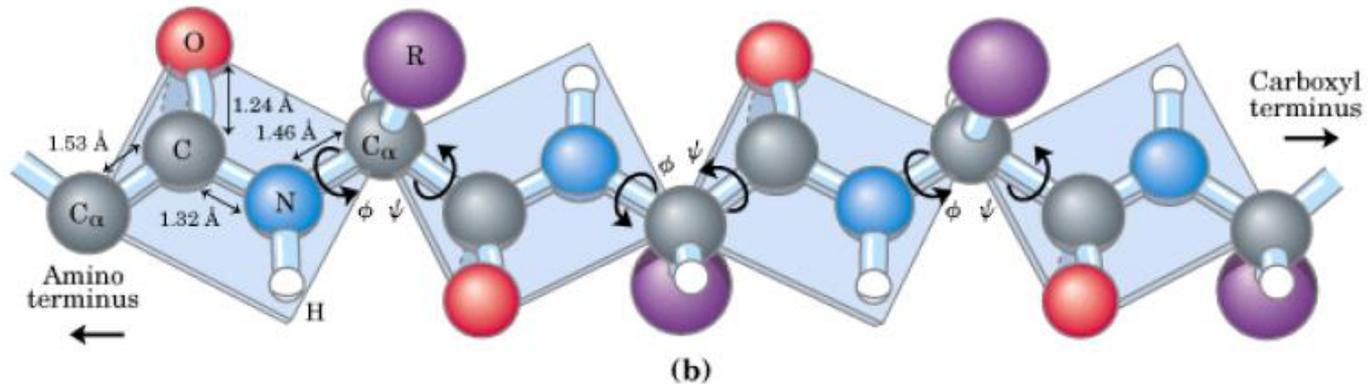
Quaternary structure



Assembled subunits

Ângulos de rotação da cadeia polipeptídica em torno de um carbono alfa

Os átomos envolvidos na ligação peptídica se encontram no mesmo plano: $\omega=180^\circ$ (trans) ou 0° (cis)



Os ângulos ϕ (phi) e ψ (psi) tem “livre” rotação

ψ - (psi) – ângulo de rotação entre o C α e o C

ϕ (fi) – ângulo de rotação entre o C α e N

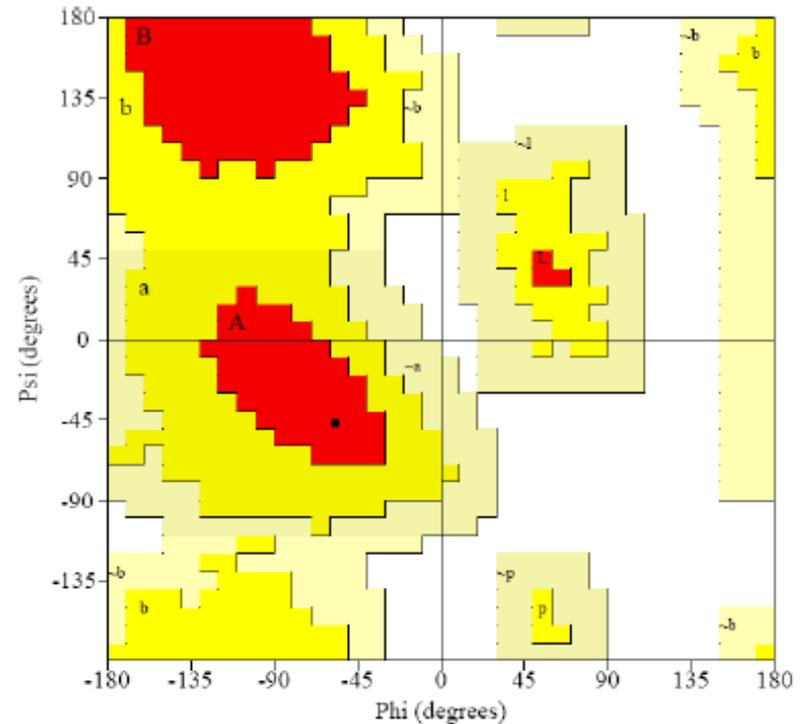
Configuração em *trans* de seus átomos de H e O – mais estável

A configuração *cis* é desfavorável em virtude do impedimento estérico entre os grupos R

Diagrama de Ramachandran

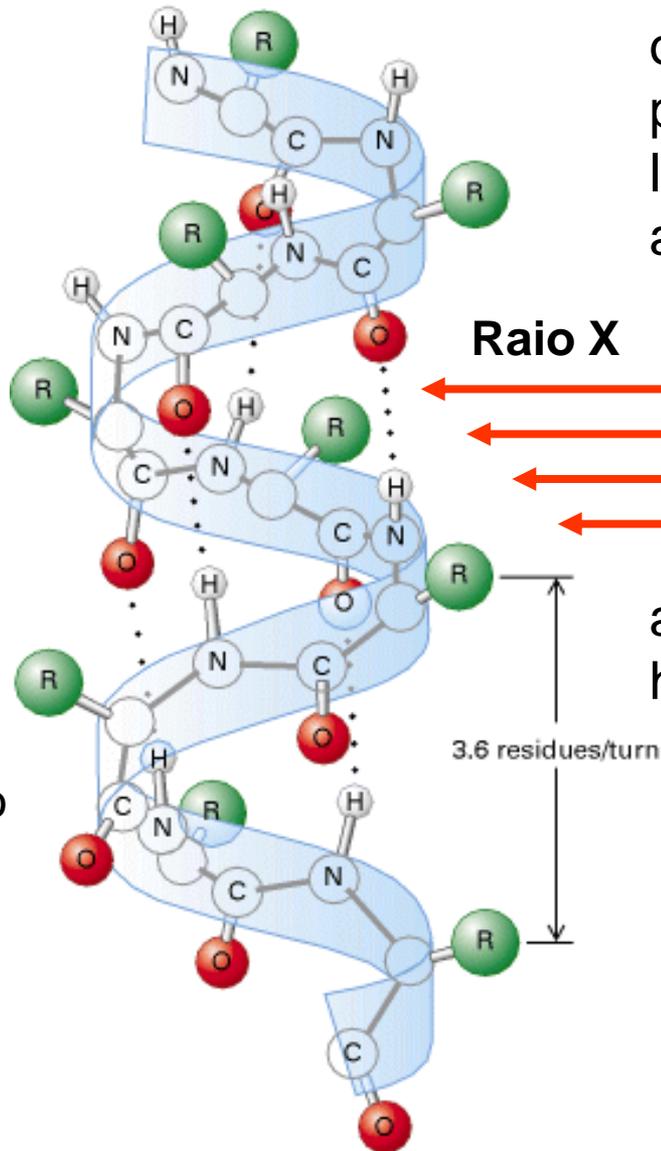
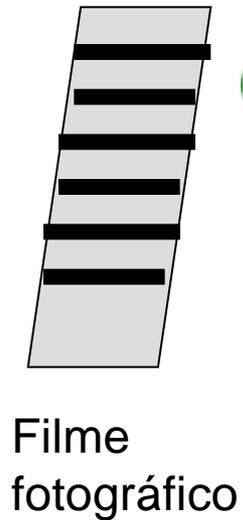
- Região permitida – vermelho
- Região adicionalmente permitida - amarelo
- Região generosamente permitida – bege
- Região proibida – branco

O programa usou dados de 118 proteínas para definir as regiões permitidas e proibidas do diagrama



Referência: Laskowski, R.A.; MacArthur, M.W., Moss, D.S., Thornton, J.M. PROCHECK: a program to check the stereochemical quality of protein structures. *J. of Appl. Cryst.* 26(2), 283-291, (1993).

Estrutura em α -hélice



o enovelamento é estabilizado por pontes de hidrogênio entre átomos das ligações peptídicas de qualquer aminoácido, **exceto prolina**;

as **cadeias laterais** dos aminoácidos voltam-se para fora da hélice.

O filamento de aminoácidos enrola-se ao redor de um eixo, formando uma escada helicoidal chamada **alfa-hélice**.

Estrutura β

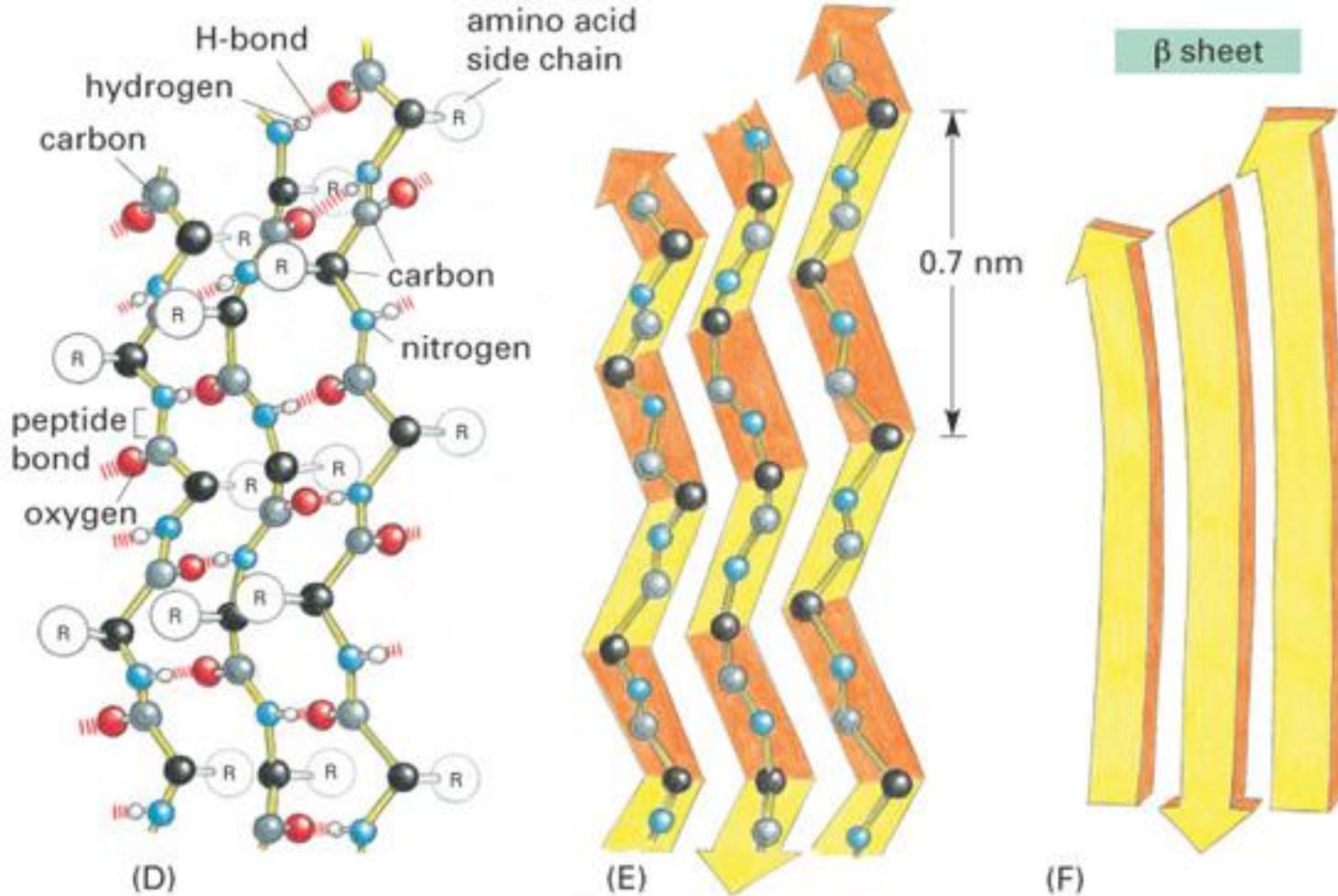
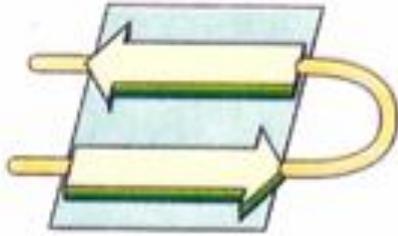
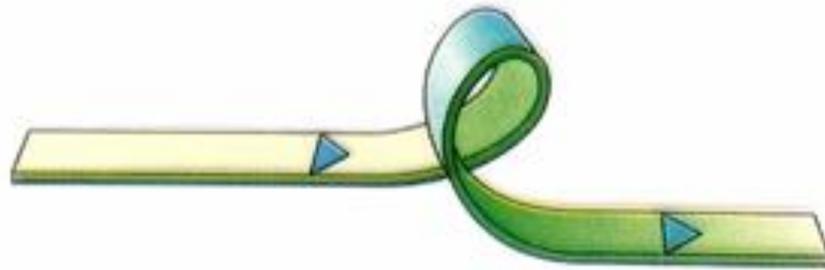
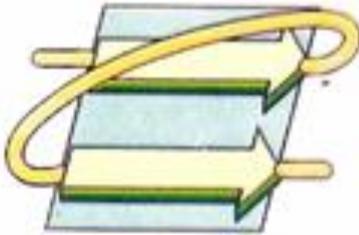


Figure 4-10 part 2 of 2 Essential Cell Biology, 2/e. (© 2004 Garland Science)

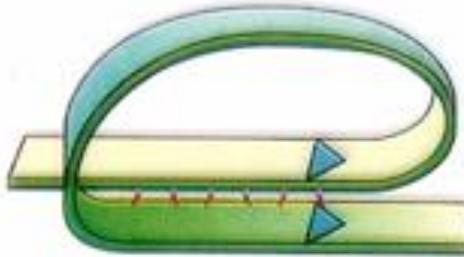
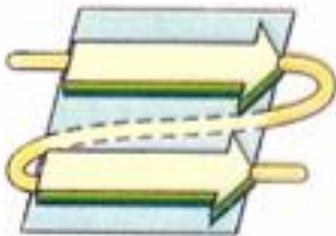
antiparalela



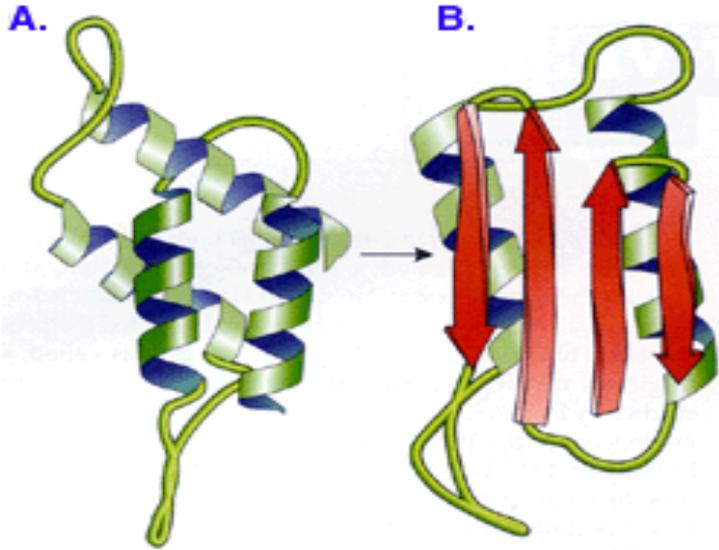
Paralela, torção à direita



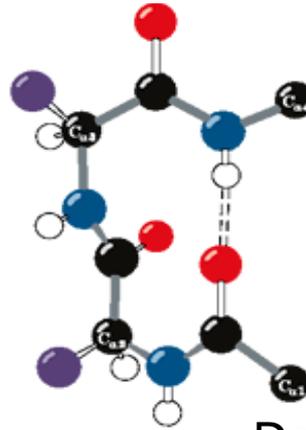
Paralela, torção à esquerda



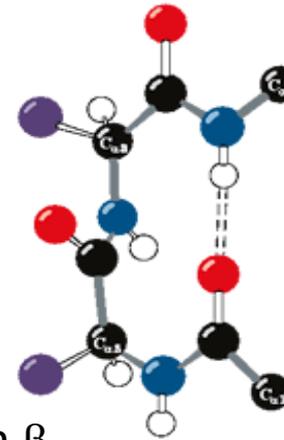
Alças e voltas



tipo 1



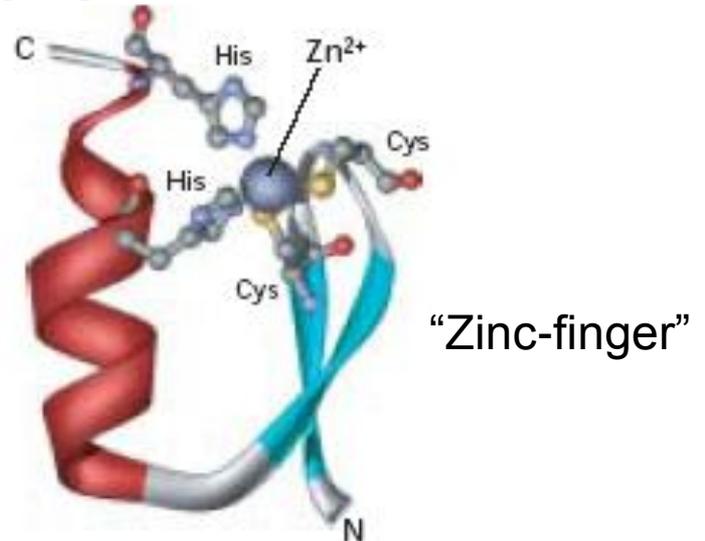
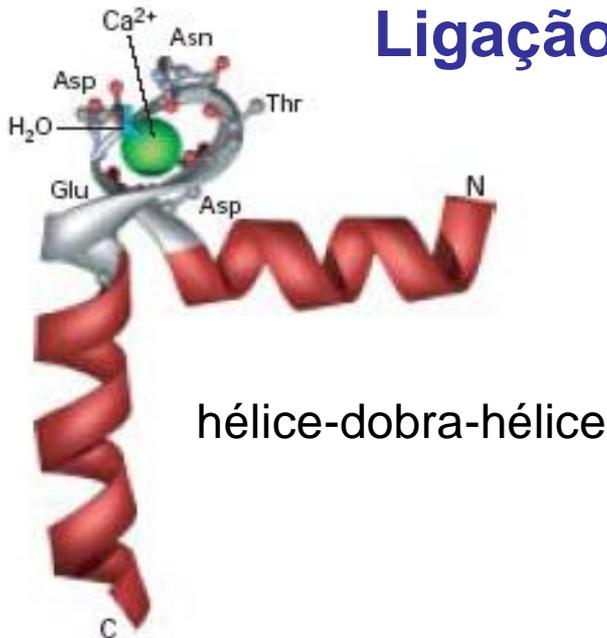
tipo 2



Notar ligação de hidrogênio entre os grupos peptídicos do 1º e 4º resíduo.
É comum encontrar Pro e Gly nestas estruturas

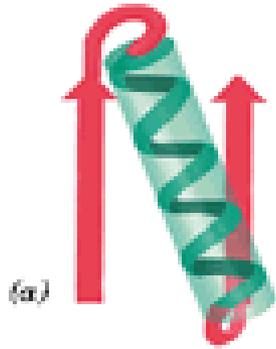
Dobra β

Ligação com íons

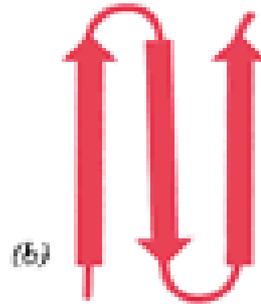


Estruturas supersecundárias ou motivos

Beta-alfa-beta



Só beta



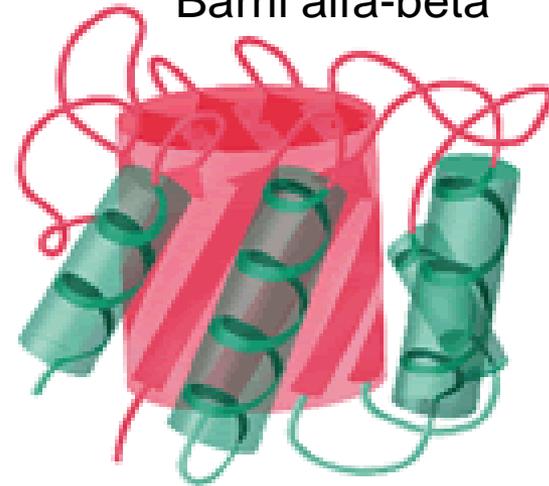
Só alfa



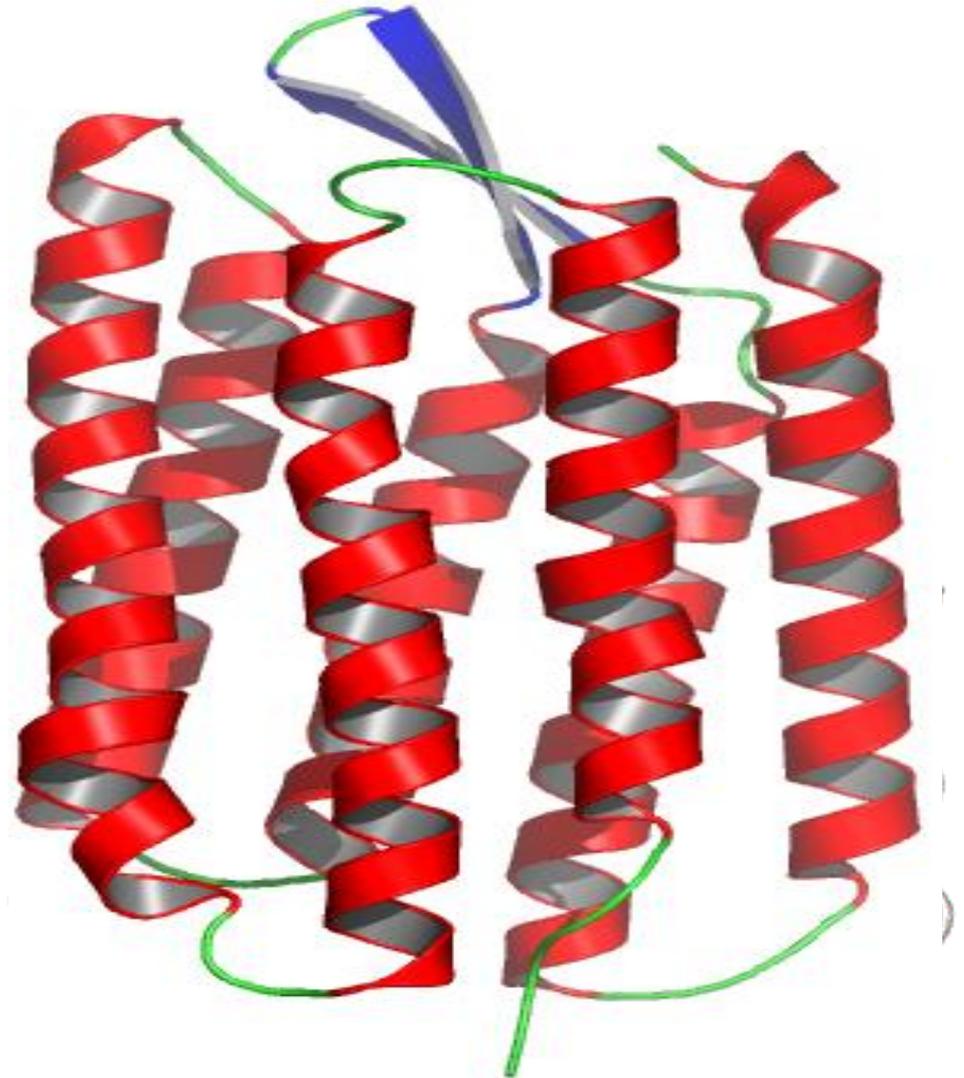
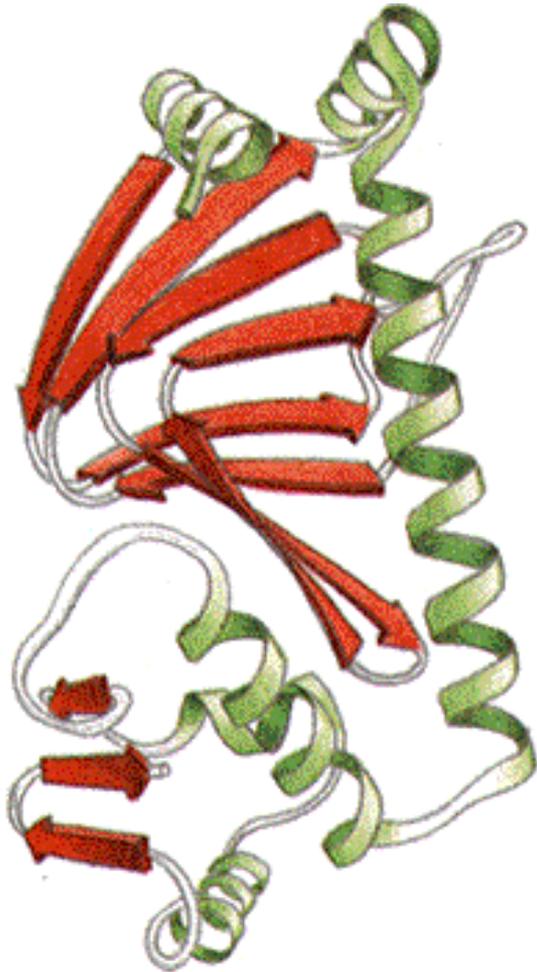
Barril beta



Barril alfa-beta



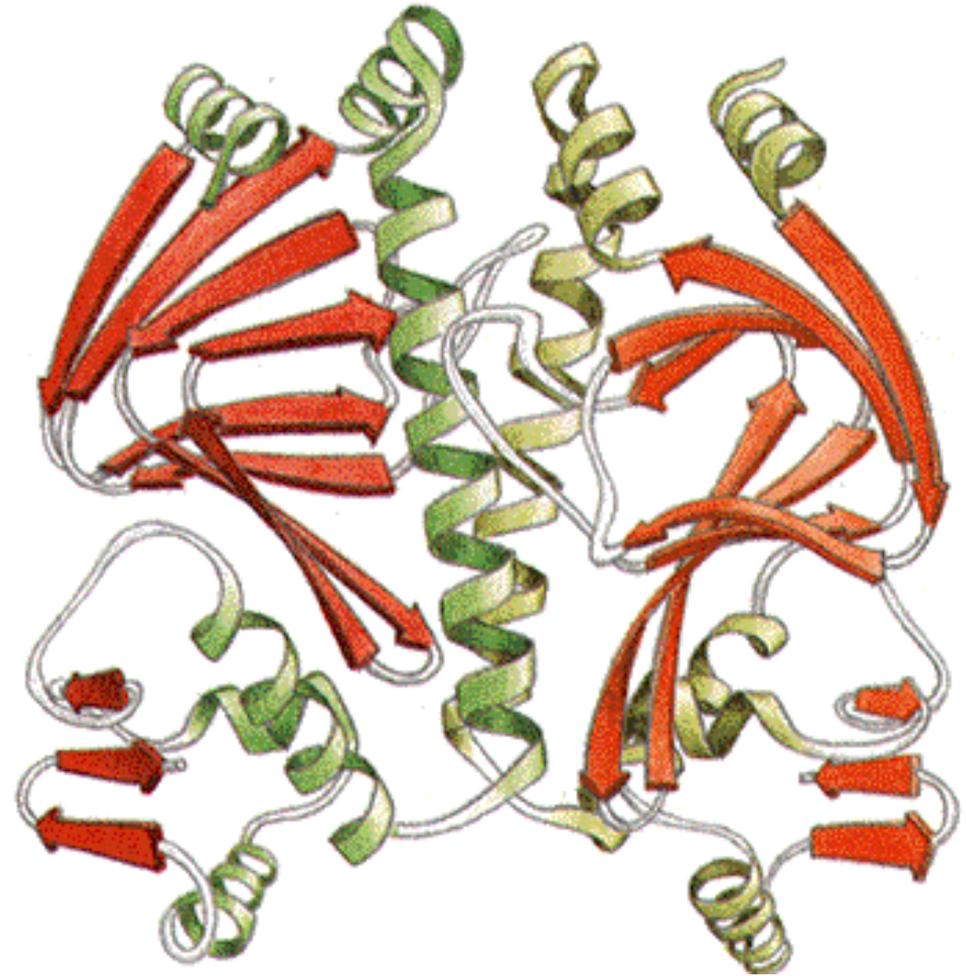
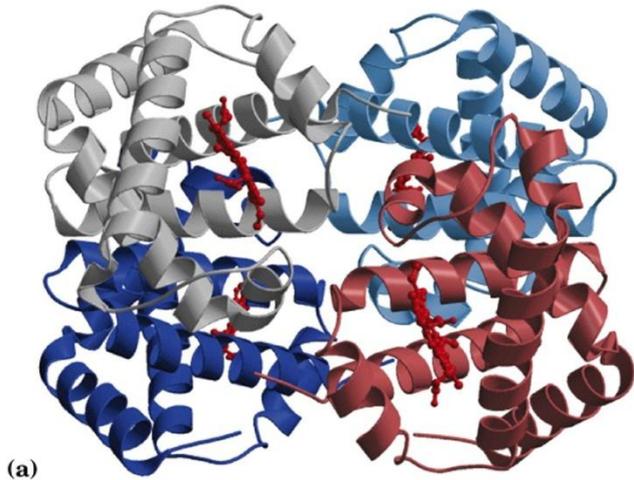
Estrutura Terciária



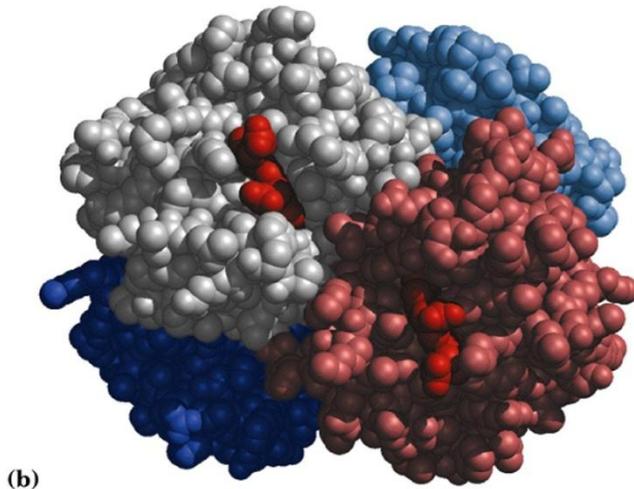
Hélices e fitas β podem ser combinadas de várias maneiras

Estrutura quaternária

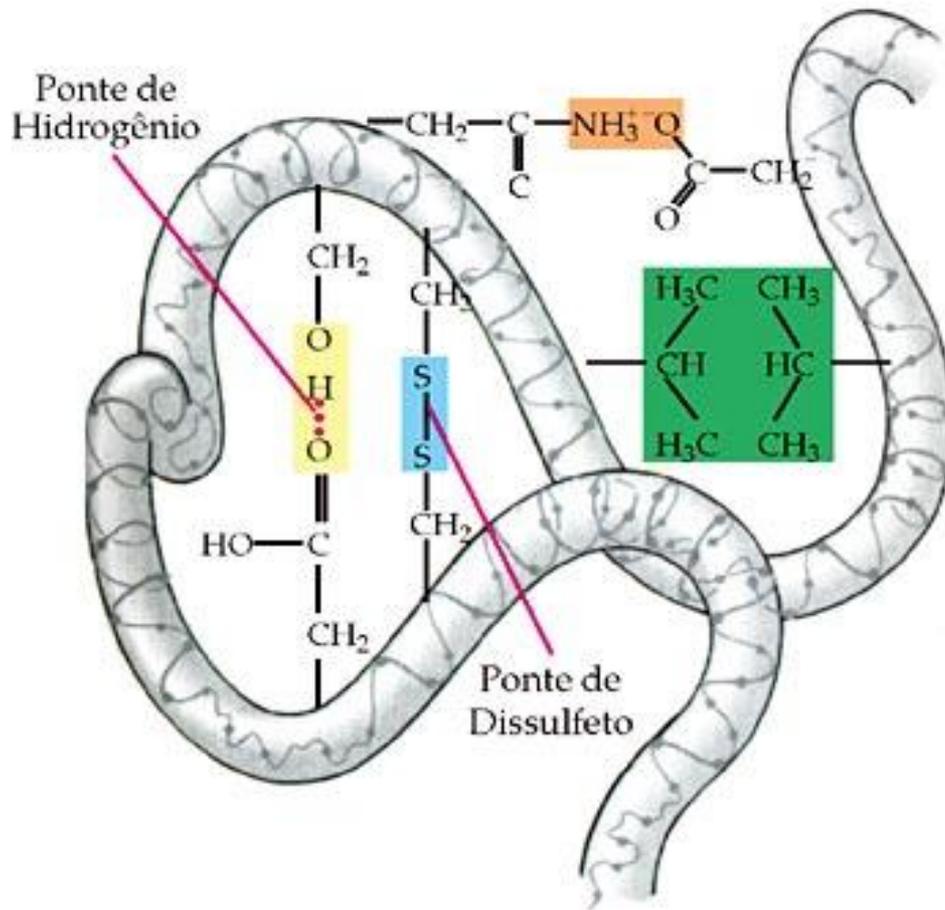
Simple Quaternary Structure



Proteína
(biológicamente ativa; dímero não covalente)



Dobramento e estabilidade de Proteínas



FORÇAS NÃO COVALENTES

Pontes de H

-Aminoácidos polares

Ligações iônicas

- Aminoácidos carregados

Interações hidrofóbicas

-Aminoácidos apolares

Forças de Van der Waals

-Qualquer aminoácido

Desnaturação - Renaturação

A sequência dos aminoácidos (não alterada na desnaturação) é o que determina a estrutura 3D das proteínas – Experimentos de Christian Anfinsen com RNase A.

- **Condições diferentes das celulares** levam as proteínas à desnaturação
- Perda da **estrutura** pode levar também à perda da **função**
- Calor, pHs extremos, temperatura (?), solventes orgânicos, detergentes

