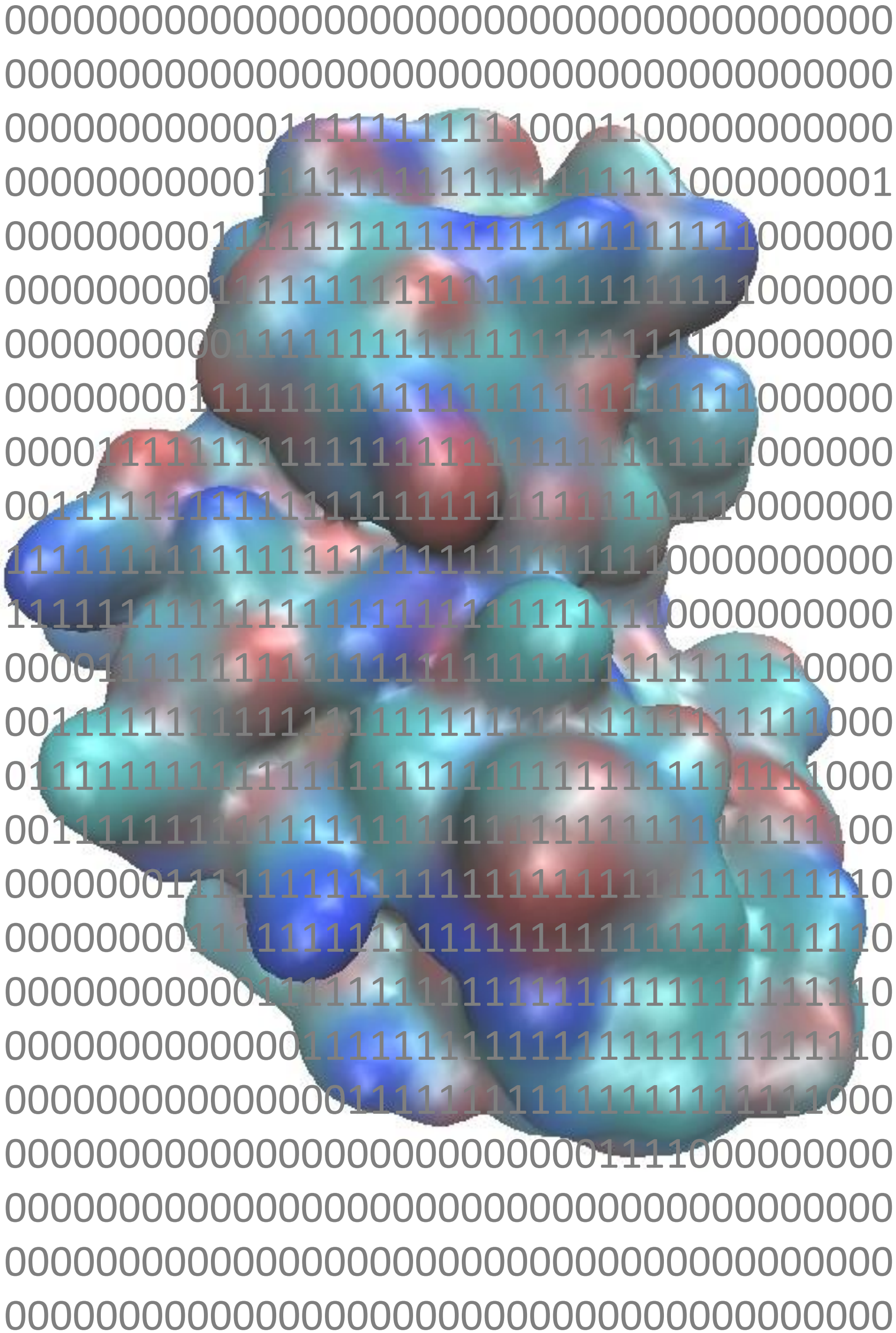
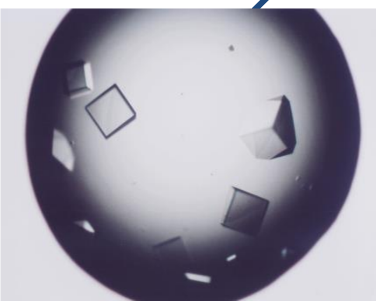


Biologia Estrutural

Séries de Fourier

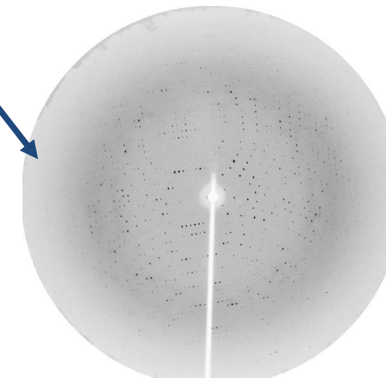
Etapas para resolução da estrutura 3D de macromoléculas biológicas por cristalografia

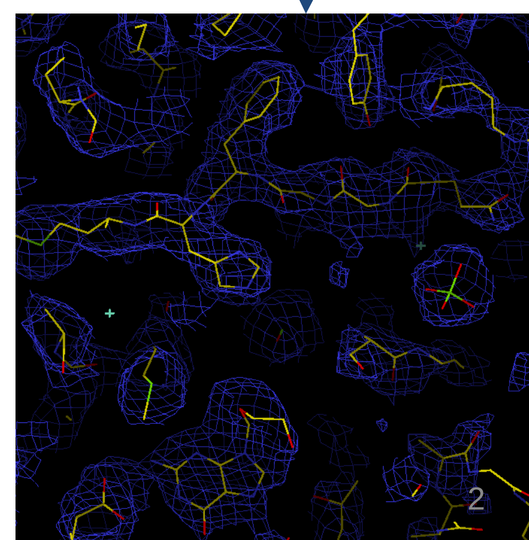


1. Cristalização.

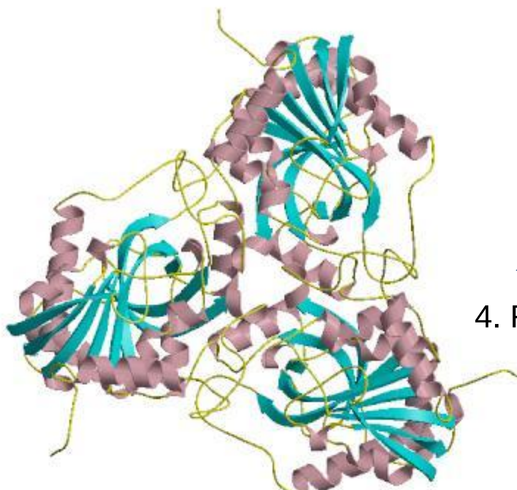
2. Coleta de dados de difração de raios X.

3. Interpretação do padrão de difração de raios X





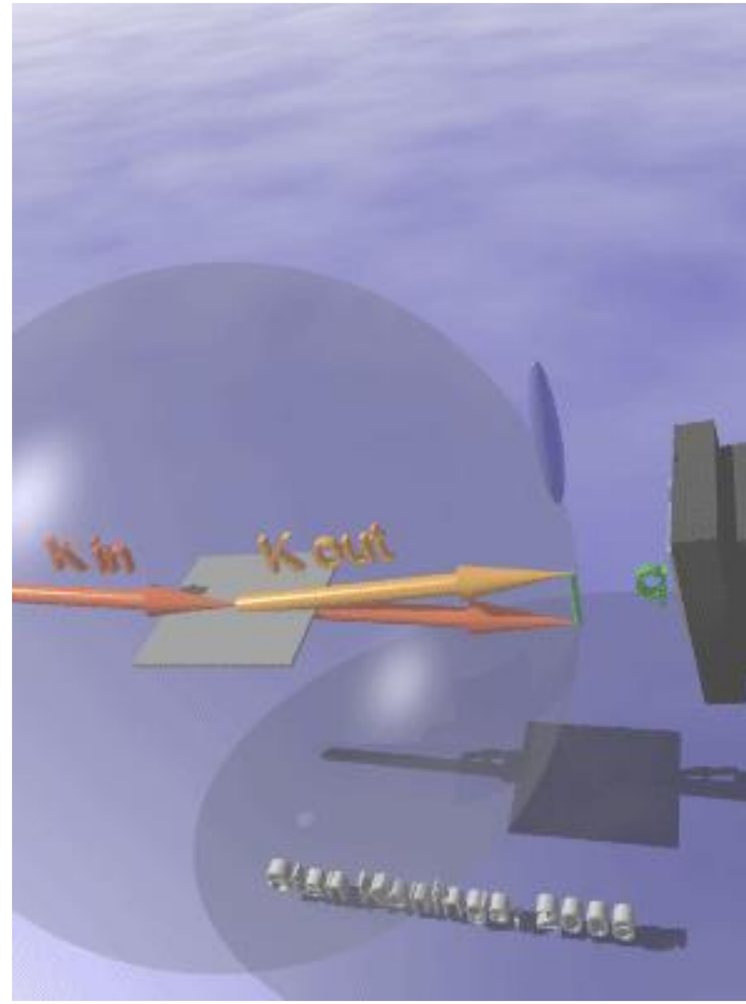
4. Resolução da estrutura.



5. Análise.

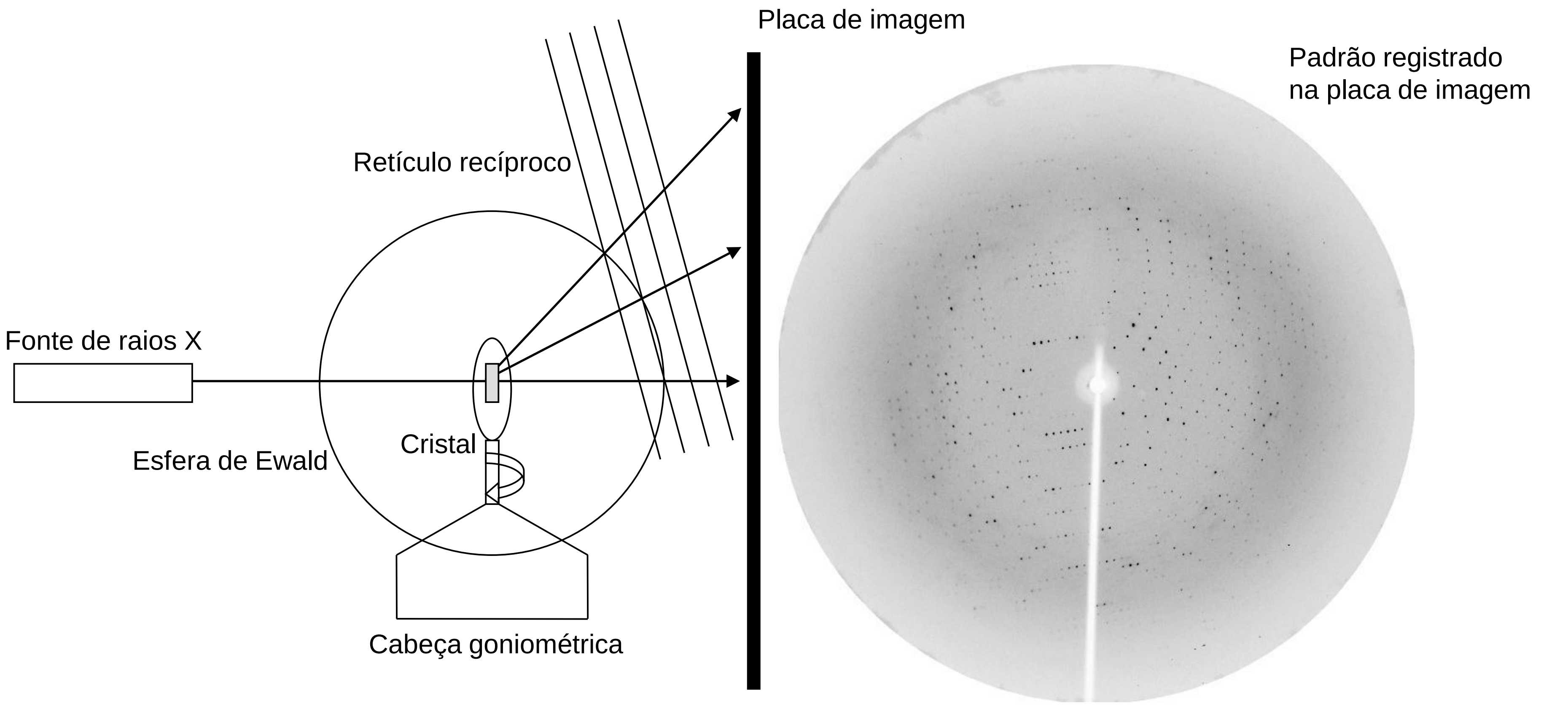
Esfera de Ewald

Vimos na aula 6 que podemos representar o fenômeno de difração de raios X por um cristal, como a passagem de um ponto do retículo recíproco pela esfera de Ewald, como indicado na animação ao lado.

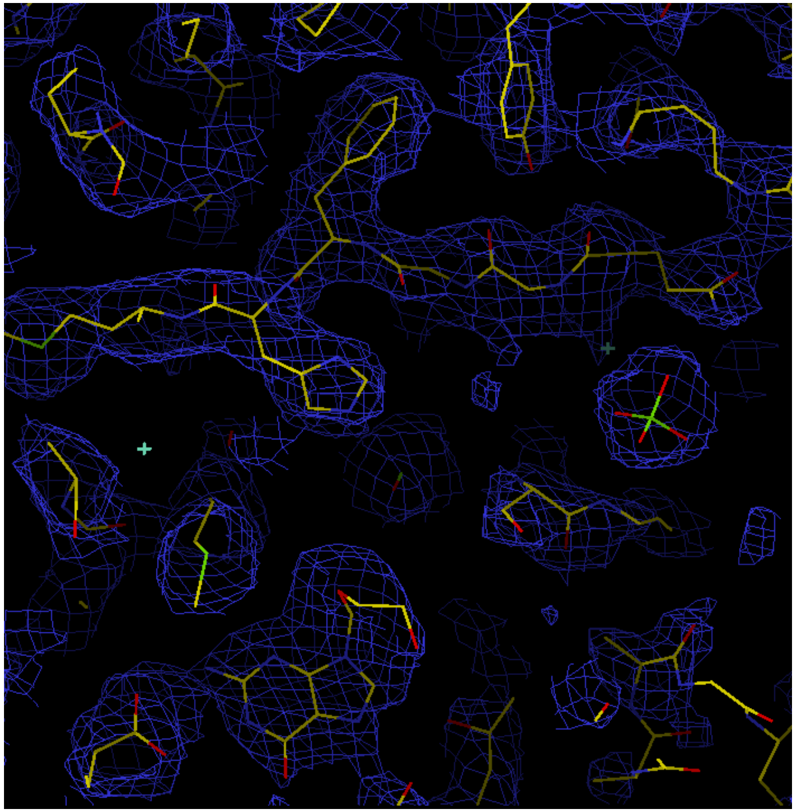


Fonte: http://www.science.uva.nl/research/cmp/docs/Goedkoop/

As reflexões registradas na imagem de difração podem ser interpretadas como resultado da reflexão de um plano de índice hkl, onde hkl são os índices de Miller da família de plano.

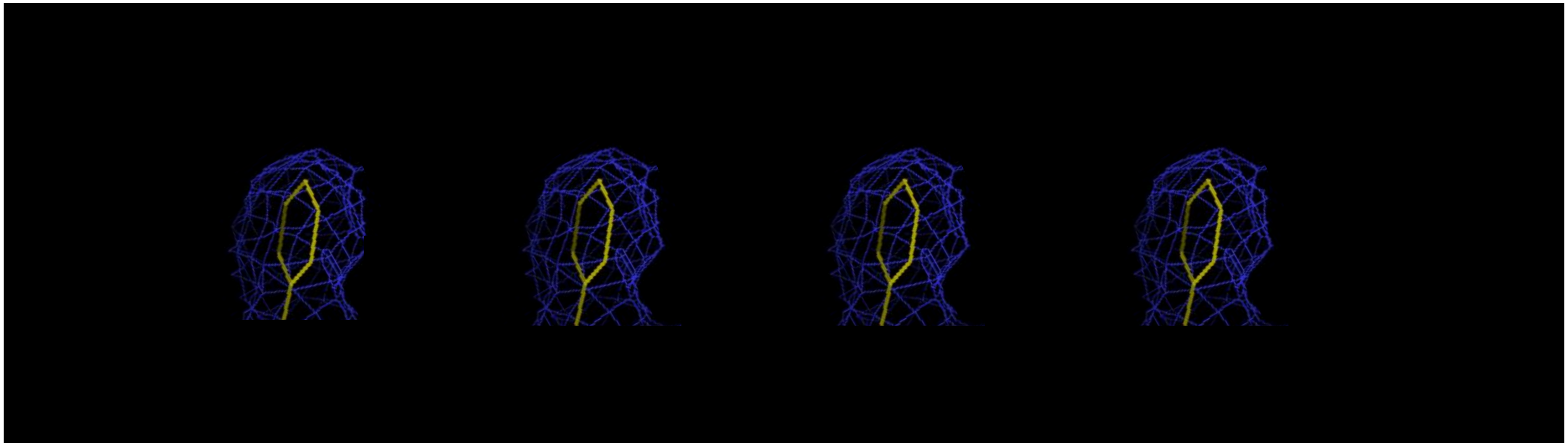


Veremos hoje que sistemas periódicos, como cristais, podem ser representados por funções simples, como seno ou cosseno. Não iremos fazer da dedução matemática de tal afirmação, simplesmente veremos como podemos somar funções simples que geram representações complexas repetitivas. A melhor forma de entendermos é através de um exemplo prático. As funções matemáticas, que fazem uso de seno e cosseno para representação de sistemas periódicos, são chamadas de **séries de Fourier**.

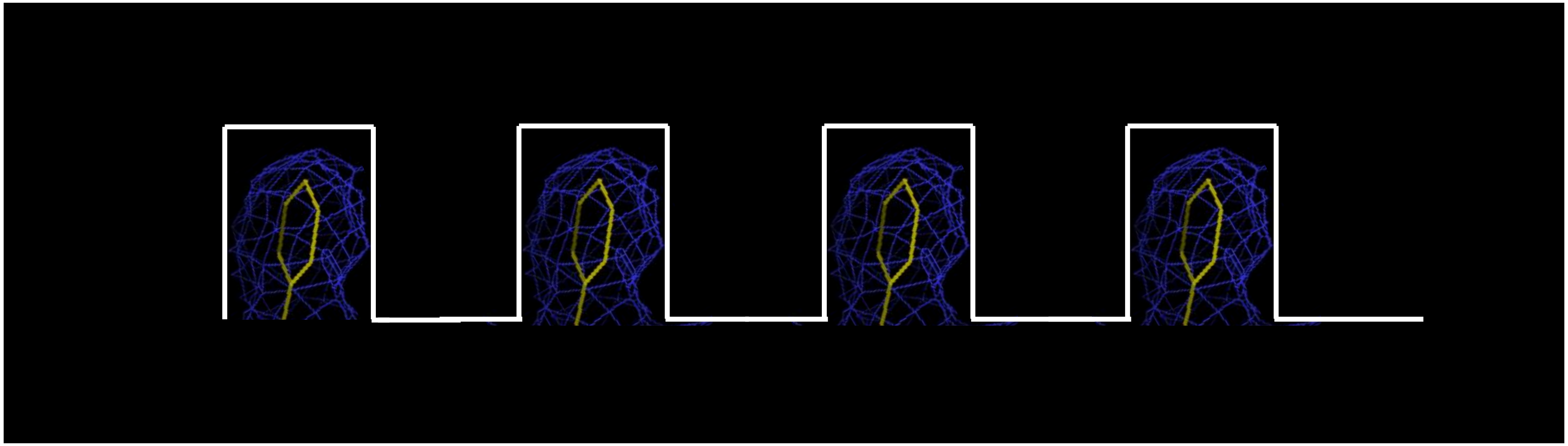


Densidade eletrônica de uma cristal de proteína

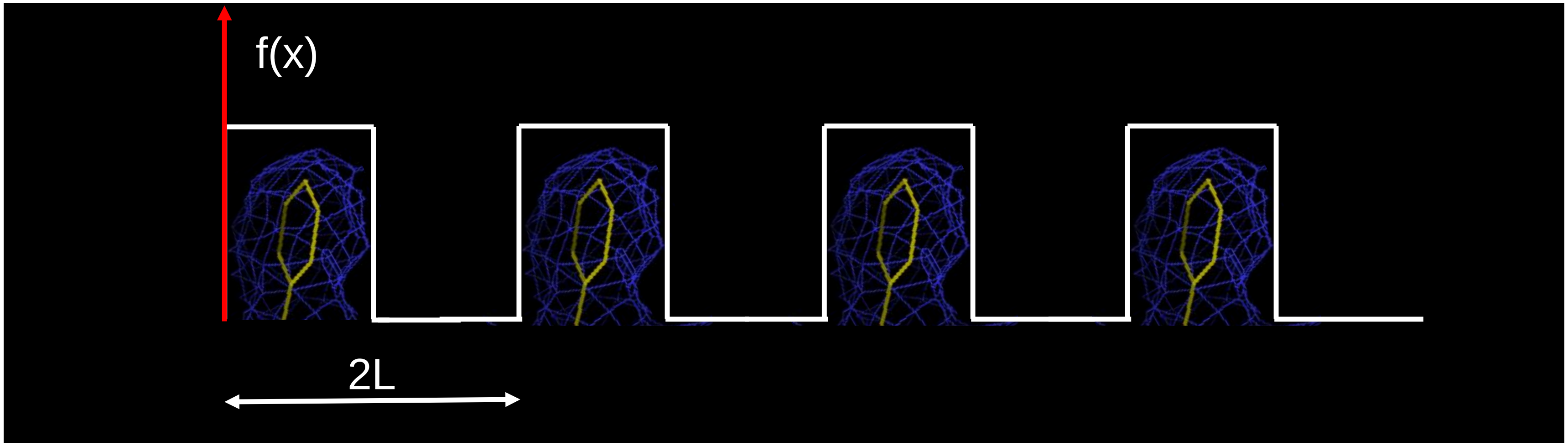
Com um pouco de abstração, podemos imaginar um cristal unidimensional, que usaremos como exemplo para representar a densidade eletrônica, a partir da soma de funções seno e cosseno. Veja o trecho de uma densidade eletrônica desenhado abaixo, onde temos a repetição da cadeia lateral da fenilalanina.



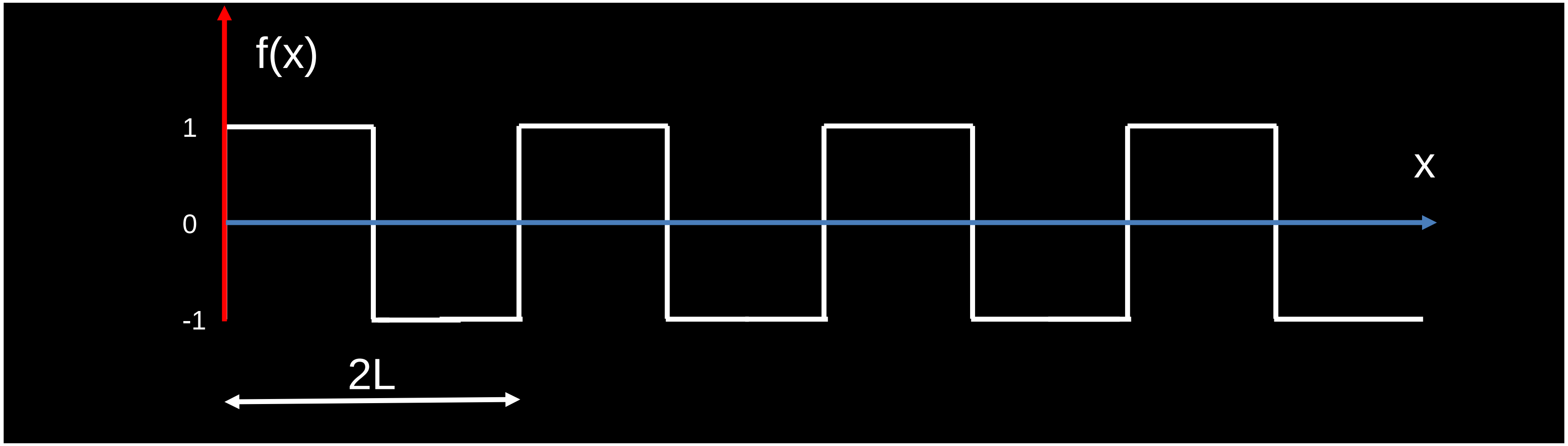
Podemos aproximar a densidade eletrônica, desenhada com um gradeado azul, como uma função degrau, sobreposta à imagem. A presença de densidade eletrônica da cadeia lateral da fenilalanina, pode ser aproximada por uma caixa que a envolve, desenhada pela linha branca.



A altura da linha branca é o valor da função da posição x, ou seja, f(x), como representado abaixo. Podemos considerar que o período da função f(x) é 2L, ou seja, para cada 2L a função f(x) se repete. Assim podemos reduzir o problema da representação matemática do nosso cristal unidimensional, a uma representação de f(x).



Abaixo temos nossa função f(x). Podemos representar nosso eixo x cortando os degraus pela metade, como representado abaixo. A função f(x) varia entre um máximo e um mínimo, por conveniência fixaremos o máximo em 1 e o mínimo em -1, como indicado abaixo.



Por último, podemos representar nosso sistema, considerando só a parte que se repete, como indicada abaixo. A função f(x) não tem relação óbvia com as funções seno e cosseno, mas podemos representá-la como uma soma dessas funções, ou seja, podemos aproximar a função degrau com um soma de senos.

Consideremos que a função f(x) varia entre -1 e 1 e tem período de 2L, ou seja, ela é periódica. Podemos representar esta função periódica f(x) na forma de soma de senos (**série de Fourier**), como segue:

$$f(x) = \frac{4}{\pi} \sum_{n=1,3,5,..}^{\infty} \frac{1}{n} sen\left(\frac{n\pi x}{L}\right)$$

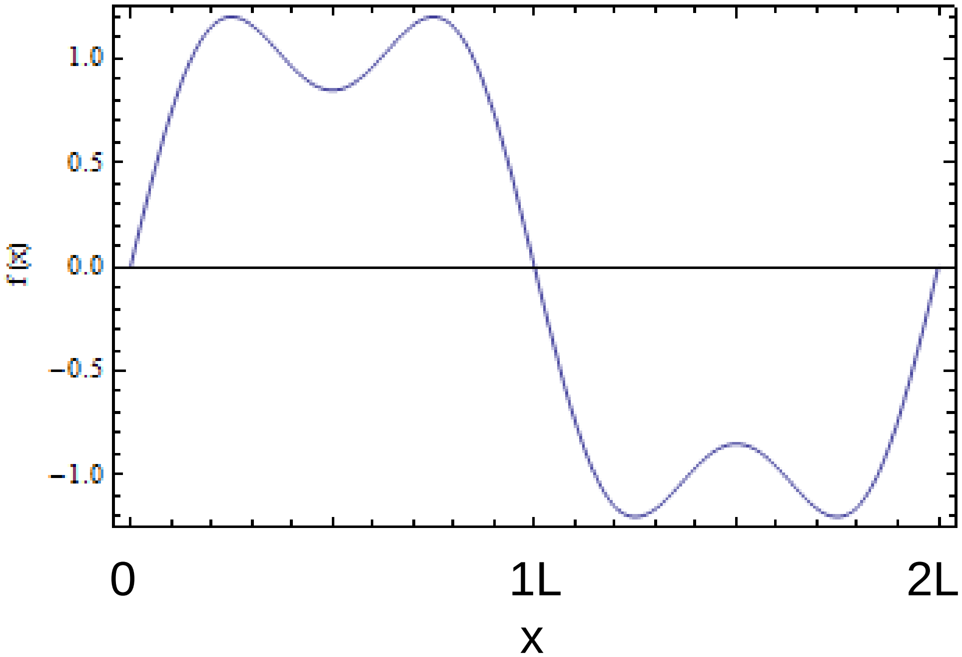
Se explicitarmos os primeiros termos da série de Fourier para a função degrau, teremos a seguinte expressão:

$$f(x) = \frac{4}{\pi} \sum_{n=1,3,5,..}^{\infty} \frac{1}{n} sen\left(\frac{n\pi x}{L}\right) = \frac{4}{\pi}\left\{sen\left(\frac{\pi x}{L}\right) + \left(\frac{1}{3}\right) sen\left(\frac{3\pi x}{L}\right) + \left(\frac{1}{5}\right) sen\left(\frac{5\pi x}{L}\right) + \left(\frac{1}{7}\right) sen\left(\frac{7\pi x}{L}\right) + ...\right\}$$

Observe que a soma restringe-se aos n ímpares. O número de termos que usarmos na função, influenciará diretamente na qualidade de aproximação, ou seja, quanto mais termos usarmos, melhor será a representação da função degrau pela soma de senos. Nos próximos slides veremos alguns casos.

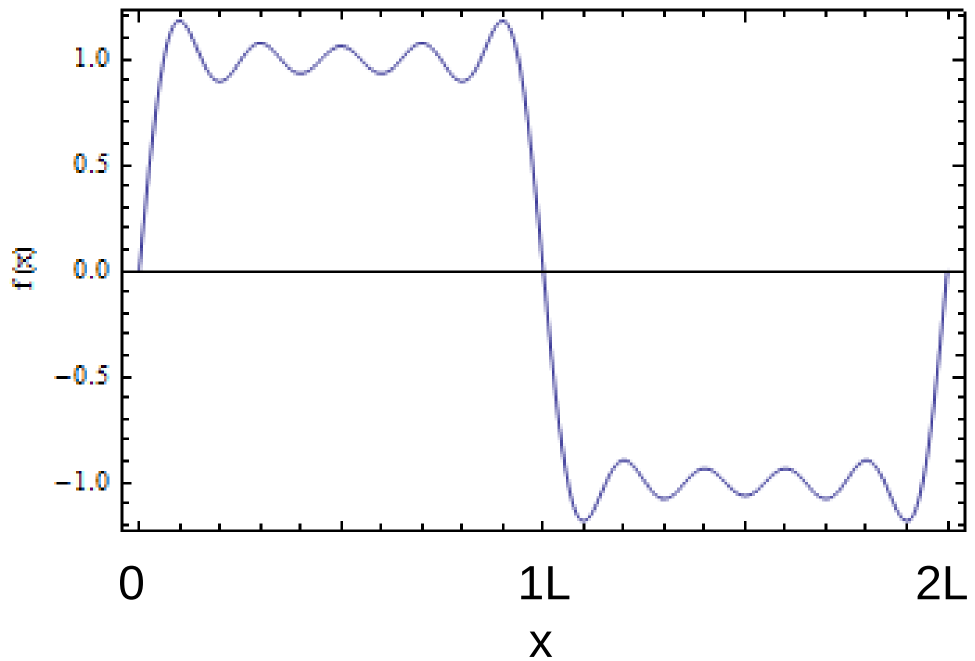
Vejamos quando só somamos os dois primeiros termos da série de Fourier, como indicado abaixo.

$$f(x)=\frac{4}{\pi}\sum_{n=1}^{3}\frac{1}{n}sen\left(\frac{n\pi x}{L}\right)=\frac{4}{\pi}\left\{sen\left(\frac{\pi x}{L}\right)+\left(\frac{1}{3}\right)sen\left(\frac{3\pi x}{L}\right)\right\}$$



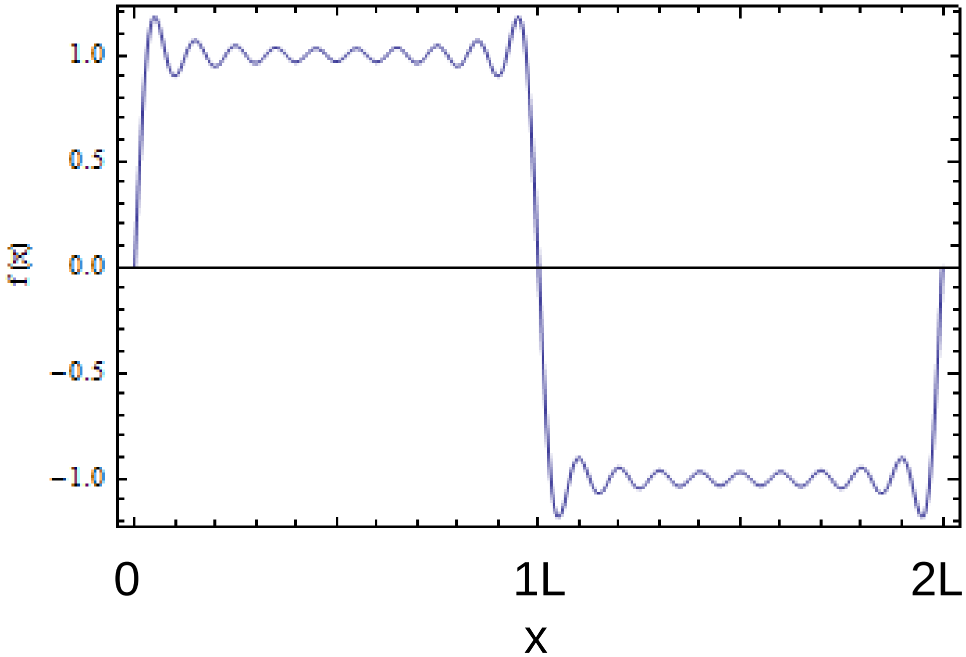
Vejamos quando só somamos os cinco primeiros termos da série, como indicado abaixo.

$$f(x) = \frac{4}{\pi}\sum_{n=1}^{9}\frac{1}{n}sen\left(\frac{n\pi x}{L}\right) = \frac{4}{\pi}\left\{sen\left(\frac{\pi x}{L}\right)+\left(\frac{1}{3}\right)sen\left(\frac{3\pi x}{L}\right)+\ldots+\left(\frac{1}{9}\right)sen\left(\frac{9\pi x}{L}\right)\right\}$$



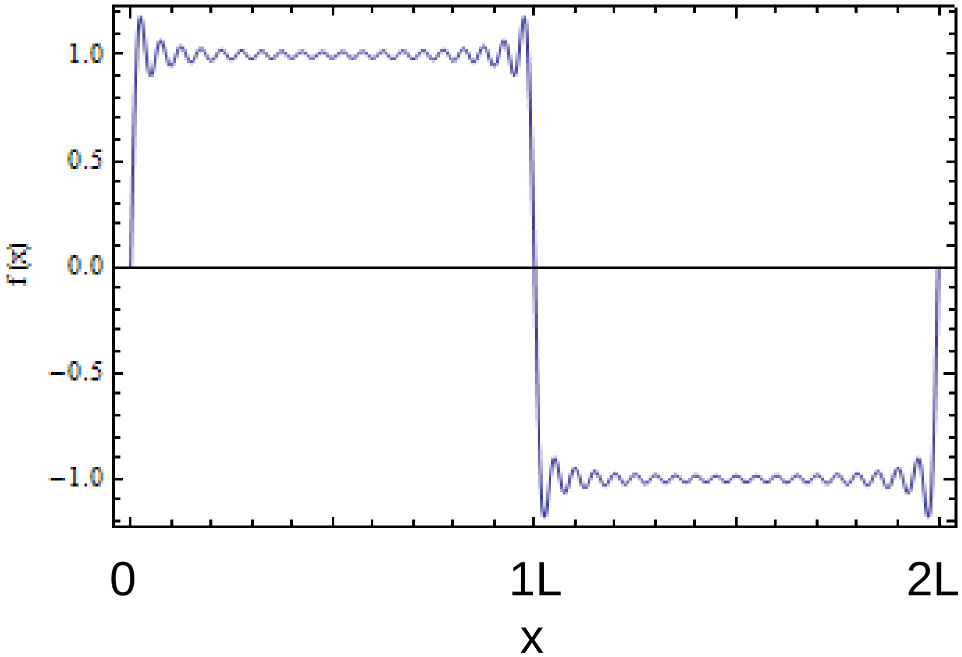
Vejamos quando só somamos os 10 primeiros termos da série, como indicado abaixo.

$$f(x) = \frac{4}{\pi}\sum_{n=1}^{19}\frac{1}{n}sen\left(\frac{n\pi x}{L}\right) = \frac{4}{\pi}\left\{sen\left(\frac{\pi x}{L}\right) + \left(\frac{1}{3}\right)sen\left(\frac{3\pi x}{L}\right) + \ldots + \left(\frac{1}{19}\right)sen\left(\frac{19\pi x}{L}\right)\right\}$$



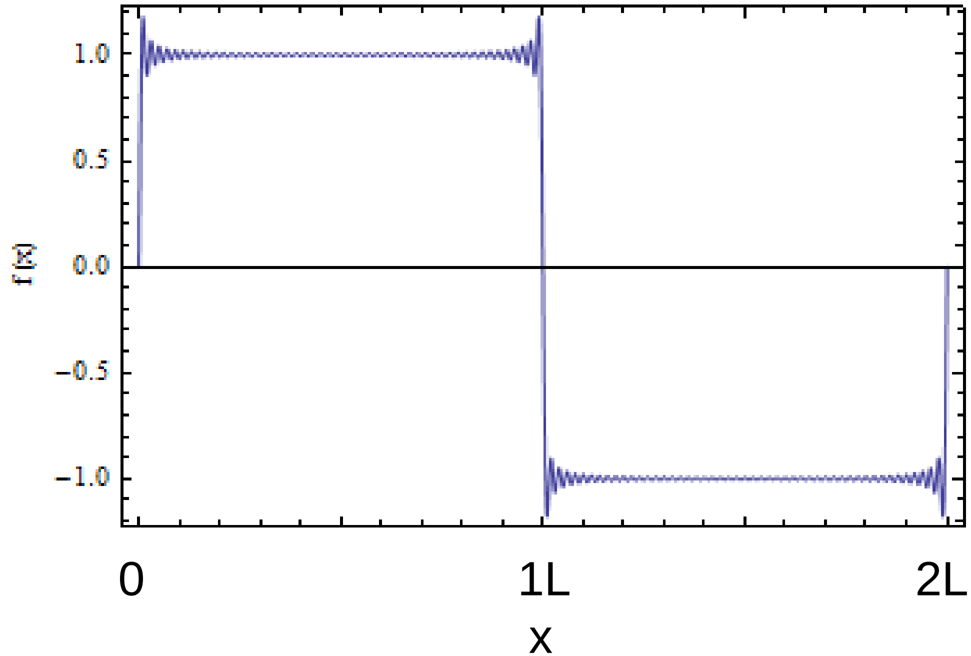
Vejamos quando só somamos os 20 primeiros termos da série, como indicado abaixo.

$$f(x)=\frac{4}{\pi}\sum_{n=1}^{39}\frac{1}{n}\,sen\left(\frac{n\pi x}{L}\right)=\frac{4}{\pi}\left\{sen\left(\frac{\pi x}{L}\right)+\left(\frac{1}{3}\right)sen\left(\frac{3\pi x}{L}\right)+\ldots+\left(\frac{1}{39}\right)sen\left(\frac{39\pi x}{L}\right)\right\}$$



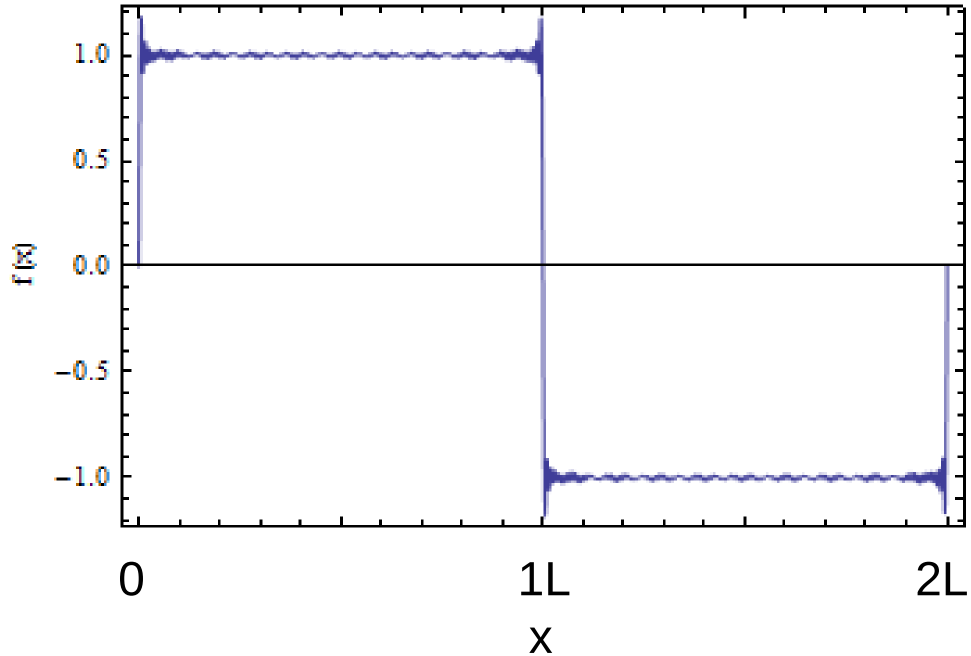
Vejamos quando só somamos os 50 primeiros termos da série, como indicado abaixo.

$$f(x)=\frac{4}{\pi}\sum_{n=1}^{99}\frac{1}{n}sen\left(\frac{n\pi x}{L}\right)=\frac{4}{\pi}\left\{sen\left(\frac{\pi x}{L}\right)+\left(\frac{1}{3}\right)sen\left(\frac{3\pi x}{L}\right)+\ldots+\left(\frac{1}{99}\right)sen\left(\frac{99\pi x}{L}\right)\right\}$$



Vejamos quando só somamos os 100 primeiros termos da série, como indicado abaixo.

$$f(x) = \frac{4}{\pi}\sum_{n=1}^{199}\frac{1}{n}sen\left(\frac{n\pi x}{L}\right) = \frac{4}{\pi}\left\{sen\left(\frac{\pi x}{L}\right) + \left(\frac{1}{3}\right)sen\left(\frac{3\pi x}{L}\right) + \dots + \left(\frac{1}{199}\right)sen\left(\frac{199\pi x}{L}\right)\right\}$$



Vemos claramente uma aproximação com a função degrau, conforme aumentamos o número de termos na série de Fourier

Drenth, J. (1994). *Principles of Protein X-ray Crystallography*. New York: Springer-Verlag.

Rhodes, G. (2000). *Crystallography Made Crystal Clear*. 2nd ed.San Diego: Academic Press.

Stout, G. H. & Jensen, L. H. (1989). *X-Ray Structure Determination. A Practical Guide*. 2nd ed. New York: John Wiley & Sons.

Última atualização em 18 de outubro de 2018.