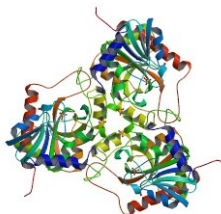


Lista de Exercícios 1 (Biologia Estrutural)

A estrutura cristalográfica da purina nucleosídeo fosforilase humana (*purine nucleoside phosphorylase*) (PNP) apresenta um monômero na unidade assimétrica, contudo, em solução, a PNP mostra a estrutura quaternária de um trímero ([de Azevedo et al., 2003](#)), conforme a figura abaixo.



Estrutura do trímero da PNP.

A estrutura cristalográfica está depositada na base de dados *Protein Data Bank* com o código de acesso [1M73](#) ([de Azevedo, Canduri et al., 2003](#)). Abaixo temos as coordenadas atômicas do carbono alfa do segundo resíduo de aminoácido (Glu) da estrutura cristalográfica da PNP (CA GLU 2). As coordenadas atômicas estão em angstroms (Å).

Determine as coordenadas atômicas do equivalente deste átomo (CA) nos outros dois monômeros. Para isto temos que aplicar a matriz rotação e o vetor translação indicados no arquivo PDB da estrutura da PNP. Esta informação está nas linhas indicadas com o REMARK 350, mostradas abaixo. O vetor translação está em Å.

Coordenadas atômicas do carbono alfa do glutamato 2

| | | | | | | | | | | | |
|------|---|----|-----|---|---|--------|--------|--------|------|-------|---|
| ATOM | 2 | CA | GLU | E | 2 | 63.289 | 28.772 | 43.954 | 1.00 | 35.56 | C |
|------|---|----|-----|---|---|--------|--------|--------|------|-------|---|

Matriz rotação para o segundo monômero

Vetor translação para o segundo monômero

| | | | | | | |
|------------|--------|---|-----------|-----------|----------|-----------|
| REMARK 350 | BIOMT1 | 2 | -0.500000 | -0.866025 | 0.000000 | 141.63000 |
| REMARK 350 | BIOMT2 | 2 | 0.866025 | -0.500000 | 0.000000 | 0.00000 |
| REMARK 350 | BIOMT3 | 2 | 0.000000 | 0.000000 | 1.000000 | 0.00000 |

Matriz rotação para o terceiro monômero

Vetor translação para o terceiro monômero

| | | | | | | |
|------------|--------|---|-----------|-----------|----------|-----------|
| REMARK 350 | BIOMT1 | 3 | -0.500000 | 0.866025 | 0.000000 | 70.81500 |
| REMARK 350 | BIOMT2 | 3 | -0.866025 | -0.500000 | 0.000000 | 122.65518 |
| REMARK 350 | BIOMT3 | 3 | 0.000000 | 0.000000 | 1.000000 | 0.00000 |

Referências

de Azevedo WF Jr, Canduri F, dos Santos DM, Silva RG, de Oliveira JS, de Carvalho LP, Basso LA, Mendes MA, Palma MS, Santos DS. Crystal structure of human purine nucleoside phosphorylase at 2.3Å resolution. *Biochem Biophys Res Commun.* 2003; 308(3): 545–552. [PubMed](#)

de Azevedo WF Jr, dos Santos GC, dos Santos DM, Olivieri JR, Canduri F, Silva RG, Basso LA, Renard G, da Fonseca IO, Mendes MA, Palma MS, Santos DS. Docking and small angle X-ray scattering studies of purine nucleoside phosphorylase. *Biochem Biophys Res Commun.* 2003; 309(4): 923–928. [PubMed](#)