LI Simpósio Brasileiro de Pesquisa Operacional
Limeira–SP, 02 a 06 de setembro de 2019

MÉTODO DE CONVERSÃO DE COORDENADAS INTERNAS PARA CARTESIANAS NO ESTUDO DE CONFORMAÇÕES DE PROTEÍNAS

Jesus Marcos Camargo
UNICAMP - Universidade Estadual de Campinas, IMECC
Rua Sérgio Buarque de Holanda 651, Campinas, SP, Brasil
marco.s.camargo@hotmail.com

Carlile Lavor
UNICAMP - Universidade Estadual de Campinas, IMECC
Rua Sérgio Buarque de Holanda 651, Campinas, SP, Brasil
clavor@ime.unicamp.br

RESUMO

As funções biológicas de uma proteína estão diretamente relacionadas à sua conformação, que é determinada basicamente pelo arranjo espacial de seus átomos. Um caminho para a descrição de tais conformações são o uso de coordenadas cartesianas, em que cada átomo da cadeia polipeptídica é associado a um ponto do espaço tridimensional. Contudo, especialmente em teorias desenvolvidas para cálculos da mecânica molecular, um outro sistema de representação torna-se indispensável: as chamadas coordenadas internas (definidas pelas distâncias entre as ligações covalentes, ângulos de ligação e ângulos de torção presentes na molécula). Dada a necessidade de conhecer ambas as representações, e por vezes ”transitar”entre elas, muitos métodos têm sido estudados e desenvolvidos a fim de criar modelos eficientes para a conversão entre os dois sistemas. Neste trabalho, apresentamos a técnica precursora elaborada por Thompson e dela extraímos um modelo genérico de conversão que permite desenvolver novos modelos baseados em operadores de rotação e translação, além de possibilitar novos sistemas de representação em outros espaços.

PALAVRAS CHAVE. Conformações de proteínas, Coordenadas internas, Coordenadas Cartesianas.

https://proceedings.science/p/106988?lang=pt-br