

INTRODUÇÃO

A Bioinformática, além de ser utilizada por pesquisadores, pode ser usada como ferramenta de ensino na área de biologia molecular e bioquímica. Este trabalho tem como objetivo apresentar uma proposta de como o software Cn3D pode ser utilizado no ensino de estruturas tridimensionais de proteínas. Em disciplinas como Química e Biologia, o uso de recursos mais ilustrativos e que exijam a participação dos alunos facilita a compreensão e a memorização de assuntos mais abstratos. No caso do estudo da estrutura tridimensional de proteínas, professores geralmente contam com auxílios visuais de imagens disponíveis na internet e em livros, porém a disponibilização de programas onde o aluno possa visualizar a imagem em 3D, selecionar e analisar aminoácidos específicos, verificando a estrutura tridimensional se torna uma ferramenta interessante a ser aplicada em sala de aula.

FERRAMENTA CN3D

O Cn3D é um software disponível na web, que permite a visualização de estruturas de biomoléculas em 3D, a partir de sequências encontradas em bancos de dados, como o NCBI (National Center for Biotechnology Information)¹.

METODOLOGIA

Um roteiro foi elaborado com as instruções para a visualização da proteína em 3D a partir do programa Cn3D. A enzima fosfolipase A2, com a sequência descrita pelo NCBI, foi selecionada como exemplo de aula para o estudo da estrutura tridimensional.

RESULTADOS

Instruções para a análise da estrutura da proteína:

1. Acessar o site: <http://www.ncbi.nlm.nih.gov/structure/>;

2. Procurar pela enzima: Acidic Phospholipase A2 From Venom of *Ophiophagus hannah*;
3. Copiar o software Cn3D;
4. Rotacionar a imagem usando o botão direito do mouse;
5. Análise de pontes de dissulfetos (Style, rendering shortcuts, tubes);
6. Análise de estruturas secundárias (Style, coloring shortcuts, secundar structure);
7. Análise da interação entre aminoácido cofator e substrato: selecionar aminoácidos desejados, clicar com o mouse na estrutura ou na sequência peptídica.

Imagens da proteína obtidas a partir da realização dos comandos:

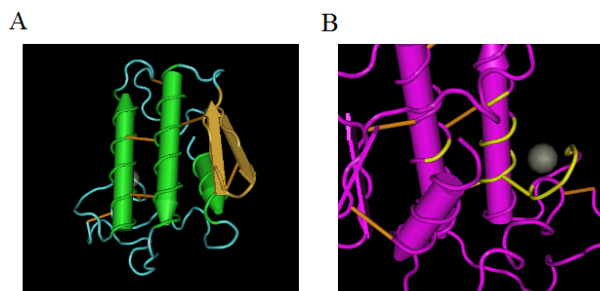


Figura 1. Imagem da estrutura tridimensional da enzima fosfolipase A2, obtida pelo uso do programa Cn3D. A) Cores, verde e mostarda representam tipos diferentes de estruturas secundárias, em amarelo pontes dissulfetos. Círculo cinza, cofator, íon Ca²⁺. B) Seleção, em amarelo, dos aminoácidos envolvidos na interação com cofator e sítio ativo (imagem ampliada).

Análise da sequência peptídica:

> Acidic phospholipase A2 from *Ophiophagus hannah*

```
MNPAHLLVLSAVCVSLGASSIPPQPLHLIQFG-  
NMIQCTVPGFLSWIKYADYGCYCGAGGSG-  
TPVDKLDRCQVHDNCYTQAQKLPACSSI-  
MDSYVVKIYSYDCSERTVTCKADNDECAA-  
FICNDRVAHCFAASPYNNNNYNIDTTTRC
```

Figura 2. Imagem da sequência peptídica que gerou a estrutura tridimensional pelo software Cn3D, cores das letras indicam diferentes estruturas secundárias, sequência selecionada em amarelo, são aminoácidos envolvidos na interação com cofator e substrato2.

CONCLUSÃO

O software Cn3D pode ser útil no entendimento de estruturas de proteínas pelos alunos, pois exige a participação dos alunos na construção da estrutura em 3D e seleção de aminoácidos importantes para relação sequência peptídica-estrutura tridimensional.

REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

- ¹ NCBI.Tutorial. Disponível em <http://www.ncbi.nlm.nih.gov/Structure/CN3D/cn3dtut.shtml>; Acessado em 10 de jul. de 2013.
- ² Zhang, H. L., Xu, S. J., Wang, Q. Y., Song, S. Y., Shu, Y. Y., & Lin, Z. J. Structure of a cardiotoxic phospholipase A2 from *Ophiophagus hannah* with the “pancreatic loop”. *Journal of structural biology*, 138,v. 3, p. 207-215, março 2002.