

## Material Suplementar para “Introdução ao problema de enovelamento de proteínas: uma abordagem utilizando modelos computacionais simplificados”

### Apêndice

Neste apêndice são definidos alguns termos utilizados na área de estudo de enovelamento de proteínas. Os termos estão organizados por ordem alfabética.

- Aminoácido:** É uma molécula constituída por um grupo  $\alpha$ -carboxila (COOH), um grupo  $\alpha$ -amina (NH<sub>2</sub>) e um grupo R com propriedades químicas características. Na natureza existem vinte aminoácidos (diferenciados pelo grupo R), os quais podem ser considerados o alfabeto no qual a linguagem da estrutura proteica é lida [1].
- Contatos Nativos:** São interações realizadas pelos resíduos de aminoácidos da proteína em seu estado nativo.
- Desnaturação:** É a ação de tirar a proteína do seu estado nativo e levá-la para um estado desordenado aleatório.
- Dinâmica Molecular:** É uma técnica computacional utilizada para resolver equações de movimento dos átomos em um sistema. Nas simulações, os átomos são considerados como partículas puntiforme que interagem com os demais átomos do sistema e, possivelmente, com campos externos[2].
- Enovelamento:** É o processo em que esta cadeia linear da proteína encontra seu estado tridimensional nativo e funcional.
- Estado nativo:** É o estado em que a proteína está enovelada de forma funcional. É considerado um conjunto de estruturas da proteína para definir o estado nativo devido às flutuações térmicas.
- Frustração:** Pode ser entendida como a impossibilidade de um sistema em satisfazer todos seus vínculos ao mesmo tempo.
- Ligação covalente:** É uma ligação química caracterizada pelo compartilhamento de um ou mais pares de elétrons entre átomos, possui uma magnitude energética entre 200 a 460 *kJ/mol*[1].
- Ligação peptídica:** É uma ligação covalente entre o grupo carboxila de um aminoácido com o grupo amina de outro aminoácido [1].
- Método de Monte Carlo:** É um método de simulação numérica baseado em conceitos e princípios da mecânica estatística. É destinado principalmente ao estudo de propriedades de sistemas em estados de equilíbrio termodinâmicos[2].
- Proteína:** É um biopolímero linear constituído de uma sequência de aminoácidos que estão unidos de modo covalente por meio de ligações peptídicas. As células geralmente contêm milhares de proteínas diferentes, cada uma com uma atividade biológica específica[1].
- Vidro de Spin (Spin glass):** É um sistema magnético cuja essência é a desordem e os acoplamentos entre os momentos magnéticos dos distintos elementos é aleatório. Apresenta forte grau de frustração e muitos estados meta-estáveis de difícil caracterização experimental e computacional [3].

### Referências

- [1] D. Voet, J. G. Voet e C. W. Pratt, *Principles of biochemistry* (J. Wiley & sons, April, 2008).
- [2] C. Scherer, *Métodos computacionais da física* (Editora Livraria da Física, São Paulo, 2005).
- [3] M. Mezard, G. Parisi e M. A. Virasoro, *Spin glass theory and beyond* (World Scientific, Singapore, 1987).