

Material complementar**TABELA COMPLEMENTAR 01 - COMPOSIÇÃO DE AMINOÁCIDOS DAS SEQUÊNCIAS PROTEICAS RECOMBINANTES**

Aminoácido	Neu1		Neu2		Neu3	
	Nº de resíduos por molécula	Porcent. (%)	Nº de resíduos por molécula	Porcent. (%)	Nº de resíduos por molécula	Porcent. (%)
Ala	12,0	4,9	12,0	4,6	12,0	4,3
Arg	9,0	3,7	9,0	3,4	10,0	3,6
Asn	6,0	2,4	7,0	2,7	10,0	3,6
Asp	14,0	5,7	14,0	5,3	14,0	5,0
Cys	1,0	0,4	1,0	0,4	2,0	0,7
Gln	9,0	3,7	10,0	3,8	12,0	4,3
Glu	24,0	9,8	24,0	9,1	23,0	8,2
Gly	24,0	9,8	26,0	9,9	28,0	10,0
His	5,0	2,0	5,0	1,9	7,0	2,5
Ile	13,0	5,3	21,0	8,0	23,0	8,2
Leu	14,0	5,7	16,0	6,1	15,0	5,4
Lys	23,0	9,3	23,0	8,7	23,0	8,2
Met	11,0	4,5	11,0	4,2	11,0	3,9
Phe	10,0	4,1	10,0	3,8	10,0	3,6
Pro	13,0	5,3	13,0	4,9	13,0	4,7
Ser	13,0	5,3	15,0	5,7	18,0	6,5
Thr	15,0	6,1	15,0	5,7	17,0	6,1
Trp	3,0	1,2	4,0	1,5	4,0	1,4
Tyr	11,0	4,5	11,0	4,2	11,0	3,9
Val	16,0	6,5	16,0	6,1	16,0	5,7
Total	246	100	263	100	279	100

Nota: Os dados apresentados nessa tabela foram estimados e gerados automaticamente no ProtParam (Expasy).

TABELA COMPLEMENTAR 02 – PARÂMETROS FÍSICO-QUÍMICOS ESTIMADOS DAS SEQUÊNCIAS PROTEICAS RECOMBINANTES

	Neu 1	Neu 2	Neu 3
Número de átomos	3.874	4.155	4.377
Massa molecular	27.751,55	29.599,85	31.293,63
Fórmula	C ₁₂₃₇ H ₁₉₂₃ N ₃₂₈ O ₃₇₇ S ₁₂	C ₁₂₃₇ H ₂₀₇₄ N ₃₄₄ O ₃₉₈ S ₁₂	C ₁₃₈₂ H ₂₁₇₈ N ₃₄₄ O ₃₇₂ S ₁₂
pI (Ponto Isoelétrico) teórico	5,52	5,52	6,02
Coefficiente de extinção molar (Assumindo que todos os pares de resíduos de Cys formam cistina)	32.890	38.390	38.515
Coefficiente de extinção molar (Assumindo que todos os pares de resíduos de Cys estão reduzidos)	32.890	38.390	38.390
Meia-vida estimada	30 horas (Reticulócitos de mamífero) > 20 horas (levedura <i>in vivo</i>) > 10 horas (Escherichia coli <i>in vivo</i>)	30 horas (Reticulócitos de mamífero) > 20 horas (levedura <i>in vivo</i>) > 10 horas (Escherichia coli <i>in vivo</i>)	30 horas (Reticulócitos de mamífero) > 20 horas (levedura <i>in vivo</i>) > 10 horas (Escherichia coli <i>in vivo</i>)
Índice de Estabilidade	29,85	31,97	28,95
Índice alifático	66,54	77,07	74,05
Grande média do valor de hidropatia (GRAVY)	-0,602	-0,437	-0,490

Nota: Os dados apresentados nessa tabela foram estimados e gerados automaticamente no ProtParam (Expasy).

The figure displays three hydropathy index plots for proteins Neu1, Neu2, and Neu3. Each plot shows the hydropathy index (Índice de Hidropatia) on the y-axis against the residue number (Número do resíduo) on the x-axis. The y-axis ranges from -3 to 3 for Neu1 and Neu3, and from -3 to 4 for Neu2. The x-axis ranges from 0 to 250 for Neu1 and Neu3, and from 0 to 250 for Neu2. A blue shaded region indicates the hydrophobic region (Região hidrofóbica) for each protein. The legend for all plots is 'Hphob. / Kyte & Doolittle'.

- Proteína Neu1:** The hydropathy index ranges from -3 to 3. The blue shaded region (hydrophobic) is located between residues 0 and approximately 40, with a peak index of about 2.5. The x-axis ranges from 0 to 250.
- Proteína Neu2:** The hydropathy index ranges from -3 to 4. The blue shaded region (hydrophobic) is located between residues 0 and approximately 40, with a peak index of about 3. The x-axis ranges from 0 to 250.
- Proteína Neu3:** The hydropathy index ranges from -3 to 4. The blue shaded region (hydrophobic) is located between residues 0 and approximately 40, with a peak index of about 3. The x-axis ranges from 0 to 250.

Região hidrofóbica

FIGURA COMPLEMENTAR 02 – PREDIÇÃO DA ESTRUTURA SECUNDÁRIA DA PROTEÍNA NEU1

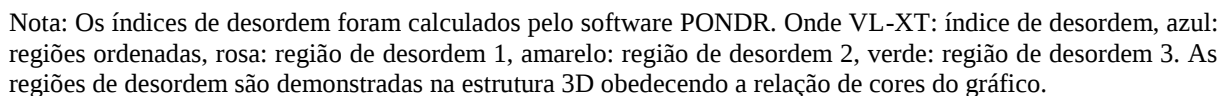
Conf: 9986389999966633430010244344455303999999996969999888751896
Pred: CC
AA: MNPNQRIITIGSICMVLELEMASSEDVIKEFMRFKVVRMEGSVNGHEFEIEGEGEGRPYE
10 20 30 40 50 60

Conf: 389899999928986502212223122041435538999702555408997289999998
Pred: EEEEEEEEEEECCCCCCCCCCCCCECCCEEEECCHHHHHHCCCCCCCCCCCCCC
AA: GTQTAKLKVTKGGPLPAWDILSPQFYGSKAYVKHPADIPDYLKLSFPFGKWERVMNF
70 80 90 100 110 120

Conf: 079499999978998999999999987679999940017621024826678641995999
Pred: CCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCECCCCCECCCEEEEEECECCCEEE
AA: EDGGVVTVTQDSSLQDGEFIYKVLRGNTNFPSDGPVMQKKTMGWEASTERMYPEDGA LKG
130 140 150 160 170 180

Conf: 99989996889959999988887088889998835899999854269986899999899
Pred: EEEEEEECC
AA: EIKMRLKLKDGGHYDAEVKTTYMAKKPVQLPGAYKTDIKLDITSHNEDYTIVEQYERAEG
190 200 210 220 230 240

FIGURA COMPLEMENTAR 03 – REGIÕES DE DESORDEM NA PROTEÍNA NEU1



Conf: 9887348999|131125788864321022124300121012765533405999999999
Pred: CCCCCEEEEEEHHHHHHHHHHHCCCEEEFECHHHHCCCCCCCCCCCCEEEEEEEEEE

AA: MNPNQKIIITIGSICMVVGIIISLILQIGNIISIWILELEMASSDEDVIKEFMRFKVRMEGSV
10 20 30 40 50 60

Conf: 6969998888751896278899999938987512222331110524354389997025
Pred: CCEEEEEEEEEECCCCEEEEEEEEEECCCCCCCCCCCCCECCCEEEFECCCECCCCHH

AA: NGHEFEIEGEGRPYEGTATAKLKVTKGGLPFAWDILSPQFYGSRAYVKHPADIPDY
70 80 90 100 110 120

Conf: 554089971899999980794999997899899999999865799999400175210
Pred: HHHHCCCCEEEEEEEEEECCCCEEEEEEEEEEECCCEEEEEEEECCECCCCCCCCCCCCC

AA: LKLSFPEGFKWERVMNFDGGVVTVTDSSLQDGEFTYKVKLRTGNFPDSGFVMQKKTMG
130 140 150 160 170 180

Conf: 13826678532994999999899968899599999988770888999883589999984
Pred: CCEEEEEEEECCEEEEEEEEEEEECCEEEEEEEEEEEECCECCCCCCCCCEEEEEEEEE

AA: WEASTERMYPEDGALKGEIKMRLKLKDGGHYDAEVKTTYMAKPVPQLPGAYKTDIKLDIT
190 200 210 220 230 240

Conf: 31799857999999899804799
Pred: ECCCCCEEEEEEEEEEECCCC

AA: SHNEDYTIVEQYERAEGRHSTGA
250 260

Nota: Arquivo de saída em formato texto gerado pelo *software* PSIPRED, onde C: Alça, E: Folha, H: Hélice, conf: confiabilidade, pred: predição da estrutura secundária, AA: sequência alvo. NA (azul) e RFP (vermelho).

[illegible]

FIGURA COMPLEMENTAR 06 – PREDIÇÃO DA ESTRUTURA SECUNDÁRIA DA PROTEÍNA NEU3

Conf: 9887437999414578752211000032256888633530676433345531014545
Pred: CCCCCCEEEEEEEEEEHHHCCCEEEEEEEFECCCCCCCCCCECCECC

AA: MNPNQKIIITGSICMVVGIIISLILQIGNIISIWIWSHSIQGTGNQNHTGICNSRLEMASSED

10 20 30 40 50 60

Conf: 44542159999999996969999888875089628989999992898651222233111
Pred: CCCCCCEEEEEEEECCEEEEEEEEEECCCEEEEEEEFECCCCCCCCCCE

AA: VIKFEMRFKVRMEGVSUNGHEFEIEGEGERPYEGTQTAKLKVTKGGPLPFAWDILSPQFQ

70 80 90 100 110 120

Conf: 04243543899960255540899718999999807949999997899899999999987
Pred: CCCEEEECCECCCCCHHHHHHCCCEEEEEEEECCEEEEEEEFECCCEEEEEEE

AA: YGSKÄYVKHPADIPDYLKLSFPBPGFKWERVMNFEDGGVVTVTDSSLDQGEFIYKVKLRG

130 140 150 160 170 180

Conf: 579999940017521023816678532995999999899958899699999888870888
Pred: ECCCCCCCCCCCCCECCCEEEEEEECCCEEEEEEEFECCCEEEEEEEFECC

AA: TNFPSDGPVMQKKTMGWEASTERMYPEDGALKGEIKMRLLKDKGHYDAEVKTTYMAKKP

190 200 210 220 230 240

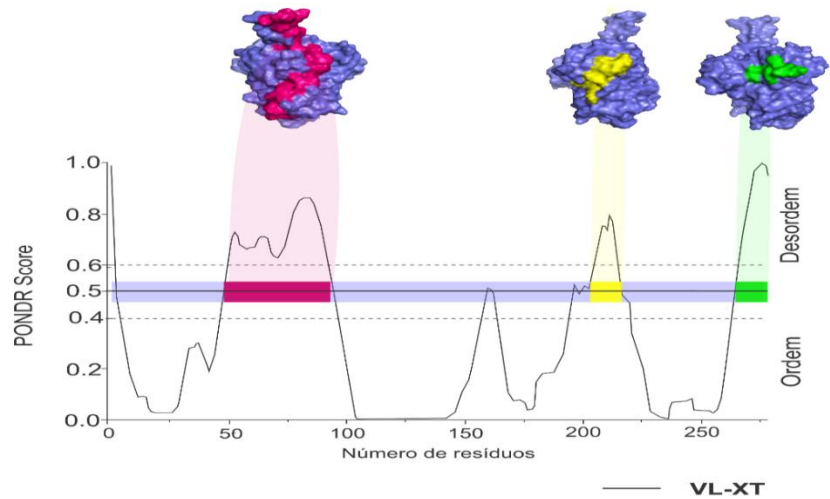
Conf: 899987368999998542699867999999799813799
Pred: CCCCCCEEEEEEEEEECCCEEEEEEEFECCCEEEEEEEFECC

AA: VQLPGAYKTDIKLDITSNEDYTIVEQYERAEGRHSTGA

250 260 270

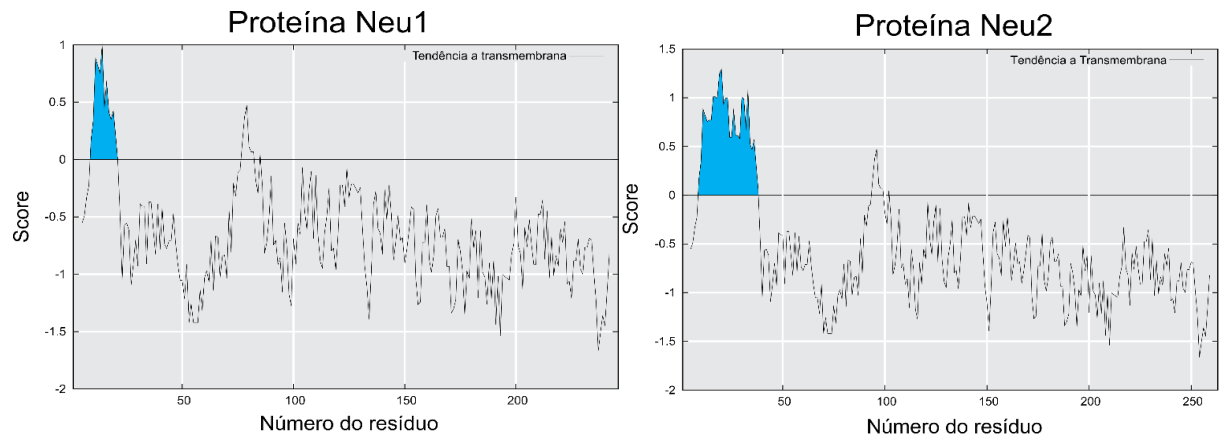
Nota: Arquivo de saída em formato texto gerado pelo *software* PSIPRED, onde C: Alça, E: Folha, H: Hélice, conf: confiabilidade, pred: predição da estrutura secundária, AA: sequência alvo. NA (azul) e RFP (vermelho).

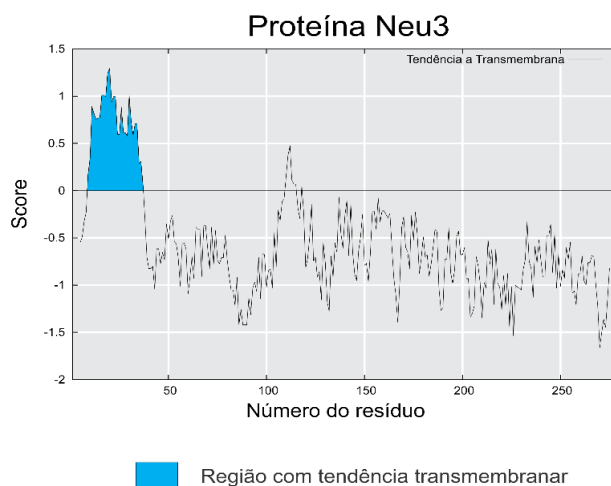
FIGURA COMPLEMENTAR 07 – REGIÕES DE DESORDEM NA PROTEÍNA NEU3



Nota: Os índices de desordem foram calculados pelo software PONDNR. Onde VL-XT: índice de desordem, azul: regiões ordenadas, rosa: região de desordem 1, amarelo: região de desordem 2, verde: região de desordem 3. As regiões de desordem são demonstradas na estrutura 3D obedecendo a relação de cores do gráfico.

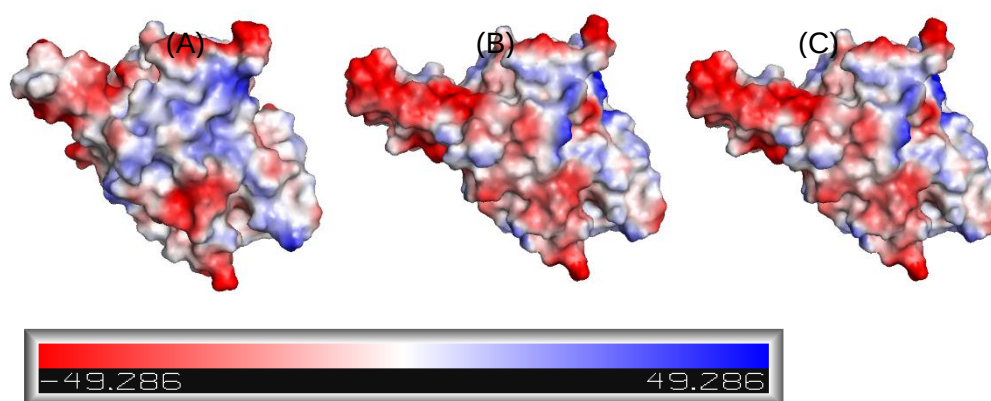
FIGURA COMPLEMENTAR 08 – REGIÕES TRANSMEMBRANARES DAS PROTEÍNAS RECOMBINANTES





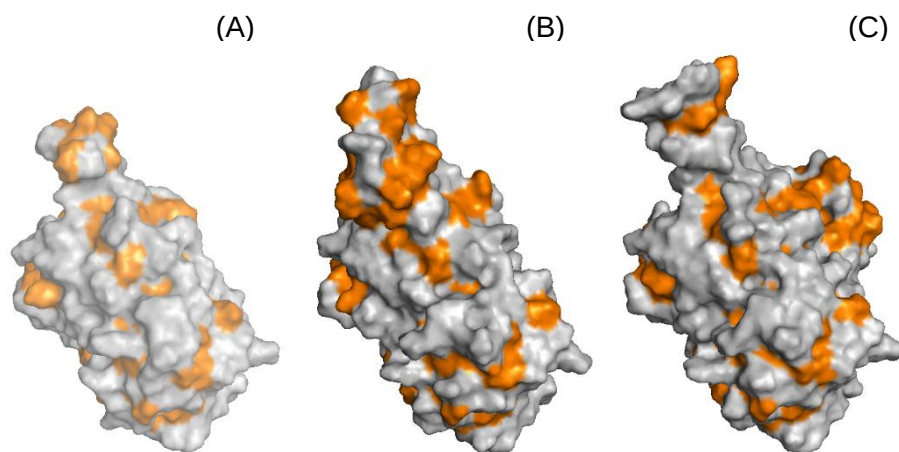
Nota: Os valores de tendência transmembrantar foram gerados pelo ProtScale (ExPASy) – *Transmembrane tendency* / Zhao & London, 1982.

FIGURA COMPLEMENTAR 09 – SUPERFÍCIE ELETROSTÁTICA DAS PROTEÍNAS RECOMBINANTES



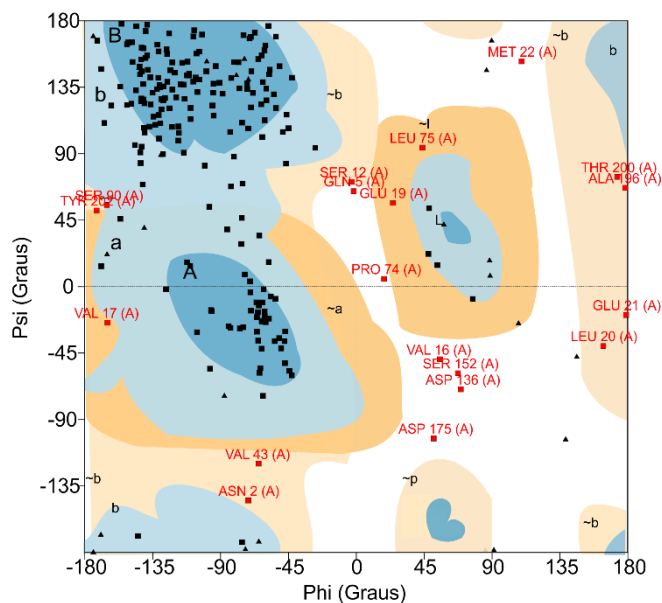
Nota: As imagens da superfície eletrostática dos modelos 3D foram geradas no Pymol – Delano, 2002. As moléculas foram coloridas de acordo com o seu potencial eletrostático, onde vermelho: regiões mais negativas, azul: regiões mais positivas, branco: regiões neutras, A: Neu1, B: Neu2 e C: Neu3.

FIGURA COMPLEMENTAR 10 – RESÍDUOS HIDROFÓBICOS DAS PROTEÍNAS RECOMBINANTES



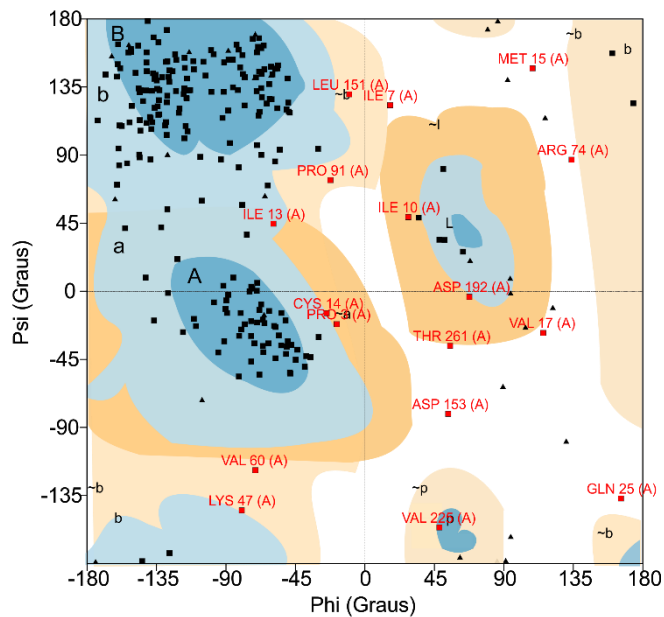
Nota: As imagens da superfície hidrofóbica dos modelos 3D foram geradas no Pymol – Delano, 2002. Onde alaranjado: resíduo hidrofóbico, cinza: resíduo não hidrofóbico, A: Neu1, B: Neu2 e C: Neu3

FIGURA COMPLEMENTAR 11 – DIAGRAMA DE RAMACHANDRAN DO MODELO 3D DA PROTEÍNA NEU1



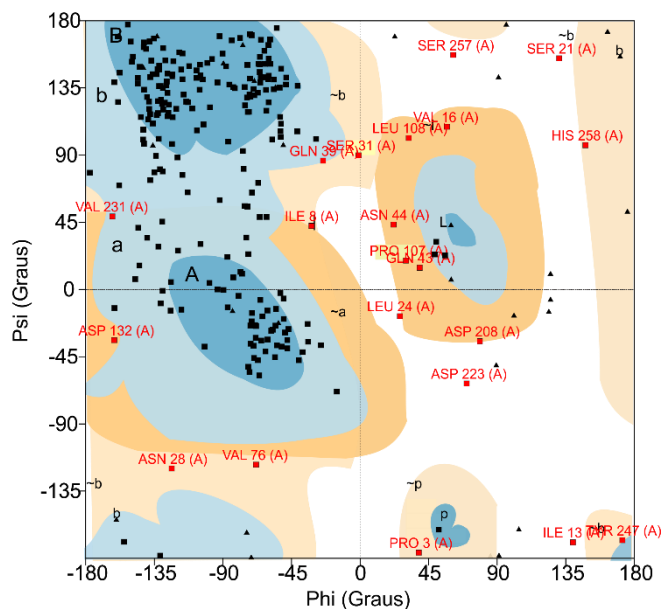
Nota: O diagrama de Ramachadran foi gerado pelo PROCHECK / Laskowski e cols., 1993, onde azul escuro: regiões muito favoráveis, azul claro: regiões favoráveis, branco: regiões desfavoráveis, preto: resíduos em regiões favoráveis, vermelho: resíduos em regiões desfavoráveis, triangulo: resíduos de glicina, quadrado: demais resíduos.

FIGURA COMPLEMENTAR 12 – DIAGRAMA DE RAMACHANDRAN DO MODELO 3D DA PROTEÍNA NEU2



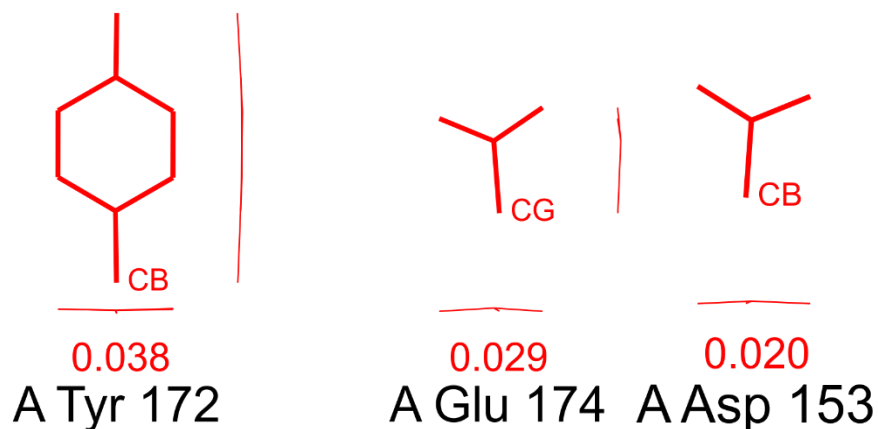
Nota: O diagrama de Ramachadran foi gerado pelo PROCHECK / Laskowski e cols., 1993, onde azul escuro: regiões muito favoráveis, azul claro: regiões favoráveis, branco: regiões desfavoráveis, preto: resíduos em regiões favoráveis, vermelho: resíduos em regiões desfavoráveis, triângulo: resíduos de glicina, quadrado: demais resíduos.

FIGURA COMPLEMENTAR 13 – DIAGRAMA DE RAMACHANDRAN DO MODELO 3D DA PROTEÍNA NEU3



Nota: O diagrama de Ramachadran foi gerado pelo PROCHECK / Laskowski e cols., 1993, onde azul escuro: regiões muito favoráveis, azul claro: regiões favoráveis, branco: regiões desfavoráveis, preto: resíduos em regiões favoráveis, vermelho: resíduos em regiões desfavoráveis, triângulo: resíduos de glicina, quadrado: demais resíduos.

FIGURA COMPLEMENTAR 14 – DISTORÇÕES NOS GRUPOS PLANARES EM NEU1



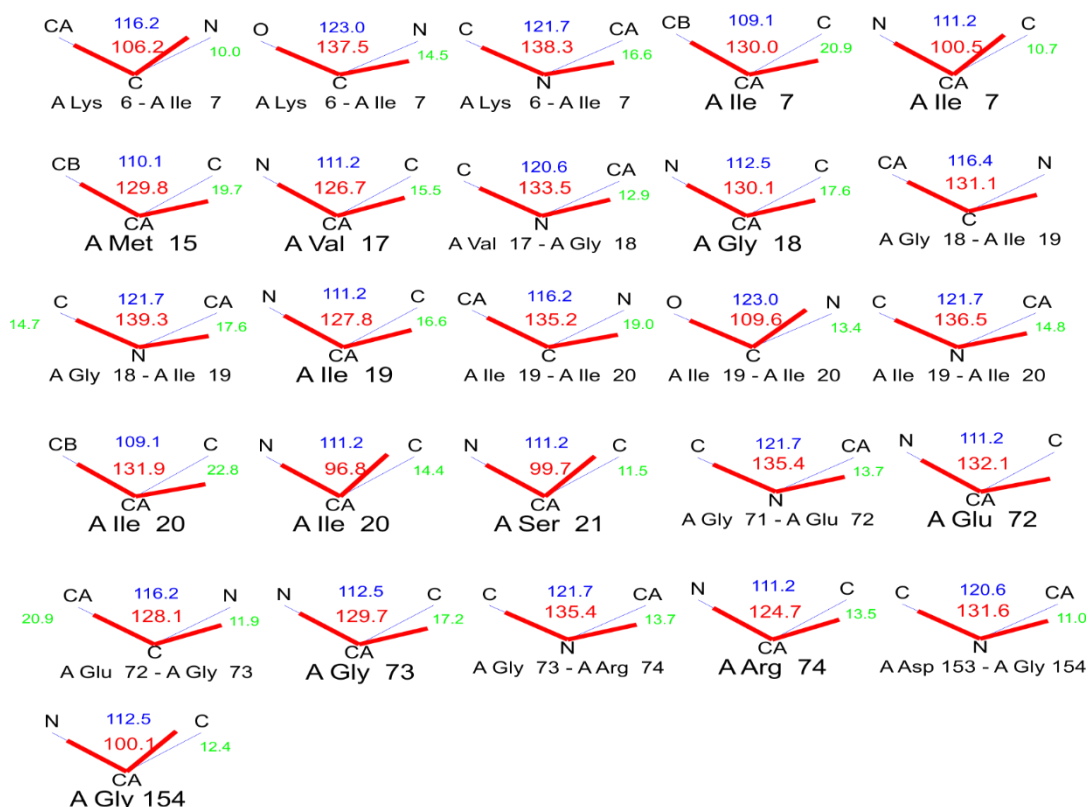
Nota: As imagens de distorções foram geradas pelo PROCHECK / Laskowski e cols., 1993. Onde a distorção foi considerada com RMS de distância para grupos planares > 0.03A ou para aromáticos > 0.02A.

FIGURA COMPLEMENTAR 15 – ALTERAÇÕES NAS DISTÂNCIAS INTERATÔMICAS EM NEU2

CA 1.540 CB 0.062 1.602 A Ile 7	CA 1.540 CB 0.068 1.608 A Ile 8	CA 1.540 CB 0.108 1.432 A Ile 10	CA 1.525 C 0.061 1.586 A Ile 13	CA 1.525 C 0.057 1.582 A Met 15	CA 1.525 C 0.086 1.611 A Val 16	N 1.458 CA 0.057 1.515 A Val 16	C 1.329 N 0.051 1.380 A Val 16 - A Val 17
CA 1.525 C 0.075 1.600 A Val 17	N 1.458 CA 0.066 1.524 A Val 17	CA 1.516 C 0.109 1.625 A Gly 18	N 1.451 CA 0.056 1.507 A Gly 18	C 1.329 N 0.062 1.391 A Gly 18 - A Ile 19	CA 1.525 C 0.057 1.582 A Ile 19	CA 1.540 CB 0.051 1.591 A Ile 19	N 1.458 CA 0.080 1.538 A Ile 19
CA 1.540 CB 0.054 1.594 A Ile 20	CA 1.525 C 0.054 1.579 A Leu 22	CA 1.525 C 0.062 1.587 A Ile 23	CA 1.525 C 0.068 1.593 A Leu 24	N 1.458 CA 0.054 1.512 A Leu 24	CA 1.525 C 0.064 1.589 A Gln 25	N 1.458 CA 0.052 1.510 A Gln 25	CA 1.525 C 0.083 1.608 A Ile 26
N 1.458 CA 0.055 1.513 A Ile 26	CA 1.516 C 0.089 1.605 A Gly 27	N 1.451 CA 0.058 1.508 A Gly 27	C 1.231 O 0.095 1.136 A Asn 28	CA 1.525 C 0.059 1.584 A Asn 28	CA 1.530 CB 0.056 1.586 A Asn 28	CA 1.540 CB 0.097 1.637 A Ile 29	N 1.458 CA 0.102 1.559 A Ile 29
CA 1.525 C 0.073 1.598 A Leu 151	N 1.458 CA 0.058 1.516 A Gln 152						

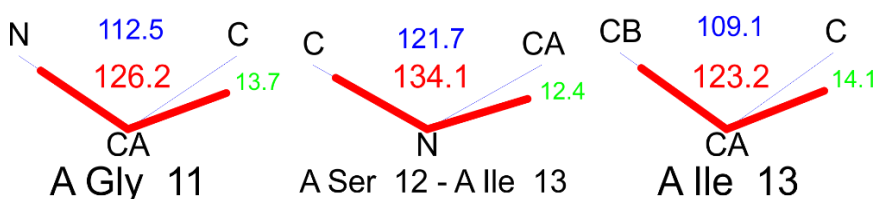
Nota: As imagens de distorções foram geradas pelo PROCHECK / Laskowski e cols., 1993. Azul: distância ideal, vermelho: distância real, verde: diferença entre a distância ideal e real. O programa mostra distâncias superiores a 0,05 A.

FIGURA COMPLEMENTAR 16 – ALTERAÇÕES NA ANGULAÇÃO ENTRE AS LIGAÇÕES ATÔMICAS EM NEU2



Nota: As imagens de distorções foram geradas pelo PROCHECK / Laskowski e cols., 1993. Azul: distância ideal, vermelho: distância real, verde: diferença entre a distância ideal e real. O programa mostra distâncias superiores a 10 graus.

FIGURA COMPLEMENTAR 17 – ALTERAÇÕES NA ANGULAÇÃO ENTRE AS LIGAÇÕES ATÔMICAS EM NEU3



Nota: As imagens de distorções foram geradas pelo PROCHECK / Laskowski e cols., 1993. Azul: distância ideal, vermelho: distância real, verde: diferença entre a distância ideal e real. O programa mostra distâncias superiores a 10 graus.

FIGURA COMPLEMENTAR 18 – DISTORÇÕES NOS GRUPOS PLANARES EM NEU3



Nota: As imagens de distorções foram geradas pelo PROCHECK / Laskowski e cols., 1993. Onde a distorção foi considerada com RMS de distância para grupos planares $> 0.03\text{\AA}$ ou para aromáticos $> 0.02\text{\AA}$