**CURSO:** DETERMINAÇÃO DE ESTRUTURAS DE BIOMOLÉCULAS POR RMN DE LÍQUIDOS - TEORIA E PRÁTICA

**PROFESSORES:** Gisele Amorim (Pólo Xerém – UFRJ) e Viviane Silva de Paula

**LIMITE DE VAGAS:** não há

**PRÉ-REQUISITO RECOMENDADO:** curso INTRODUÇÃO À DETERMINAÇÃO ESTRUTURAL E ASSINALAMENTO DE PEQUENAS MOLÉCULAS POR RMN.

**OBJETIVOS:** O curso tem por objetivo preparar o participante para o assinalamento de ressonâncias de proteínas, abordando a preparação da amostra, os experimentos e as estratégias utilizados. O curso também abordará os métodos de cálculo de estrutura de proteínas por RMN em solução. Utilizaremos o software CcpNmrAnalysis para uma abordagem semi-automática e integrada. **Os participantes deverão levar seus computadores pessoais, onde será instalada uma "máquina virtual" contendo os programas necessários para o curso. Caso tenham dados próprios para assinalamento e cálculo de estrutura, poderão levá-los.**

**PROGRAMA**

Teoria (1 dia)

**Assinalamento**

Avaliação inicial da amostra

Estratégias mais comuns de assinalamento

Assinalamento da cadeia principal

Assinalamento das cadeias laterais alifáticas

Assinalamento de cadeias laterais de resíduos aromáticos

Assinalamento de isômeros cis e trans de prolinas

Cálculo da estrutura

Prática (2 dias)

**Assinalamento**

Introdução ao uso do software CcpNmrAnalysis

Criação e *set up* do projeto

Assinalamento da cadeia principal: estratégias utilizando experimentos 2D e de tripla ressonância

Assinalamento das cadeias laterais alifáticas

Assinalamento de cadeias laterais aromáticas

**Cálculo da estrutura**

**Cálculo baseado em NOE**

Introdução ao cálculo integrando os softwares CcpNmrAnalysis e Aria

Determinação dos ângulos de diedro baseada no deslocamento químico (DANGLE e TALOS)

Ligações de hidrogênio

Montagem do projeto no Aria

Cálculo no Aria

Interpretação dos dados gerados no Aria usando o CcpNmrAnalysis