

CURSO: DETERMINAÇÃO DE ESTRUTURA DE PROTEÍNAS POR RMN DE LÍQUIDOS - TEORIA E PRÁTICA

PROFESSORA: Gisele Amorim (Campus Xerém – UFRJ)

LIMITE DE VAGAS: 15

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 os softwares CcpNmrAnalysis e Aria 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

Montagem do projeto e cálculo no Aria

Interpretação dos dados gerados no Aria usando o CcpNmrAnalysis