

CURSO AUREMN A DISTÂNCIA
ESCOLA BRASILEIRA DE RMN
SIMULAÇÃO E ANÁLISE DE DINÂMICA DE BIOMOLÉCULAS
POR TÉCNICAS COMPUTACIONAIS
19 DE MARÇO A 14 DE MAIO DE 2021

PROFESSORES:

Ronaldo Junio de Oliveira (DF-UFTM) - ronaldo.oliveira@uftm.edu.br

Alexandre de Araujo Suman (DF-UNESP) - alexandre.suman@unesp.br

Frederico Campos Freitas (DF-UFTM) - fredcfreitas@gmail.com

Guilherme Menegon Arantes (IQ-USP) - garantes@iq.usp.br

LIMITE DE VAGAS: não há.

PRÉ-REQUISITO: Computador pessoal para realizar as simulações.

OBJETIVO: Introduzir o aluno às bases para simulação de biomoléculas e análise cinética e termodinâmica por técnicas computacionais modernas. Tem como público principal alunos de Ciências Exatas e da Saúde.

PROPOSTA DE REALIZAÇÃO DO CURSO ON-LINE: Ao longo de 8 semanas, as aulas serão ministradas uma vez por semana e com duração de 2 horas. O aluno poderá acompanhar a aula e realizar os tutoriais juntamente com o professor ou assistir à gravação da aula com link a ser disponibilizado. Poderão ser atribuídas tarefas para casa ao final de cada aula.

Início do curso: 19/03/2021 – **Fim do curso:** 14/05/2021 (com intervalo na sexta-feira santa).

Será fornecido certificado aos inscritos com 75% de frequência.

INSCRIÇÕES ABERTAS – <https://eventos.galoa.com.br/dinamicadebiomoleculas-2021>

PERÍODO DE INSCRIÇÕES: 20 DE JANEIRO A 15 DE FEVEREIRO/2020.

SÓCIOS DA AUREMN R\$ 50,00 (cinquenta reais)

NÃO SÓCIOS DA AUREMN R\$ 200,00 (duzentos reais)

INFORMAÇÕES: administrativo@uremn.org

PROGRAMA

AULA 1 – INTRODUÇÃO À DINÂMICA MOLECULAR I

Fundamentos de dinâmica molecular

Discussão sobre softwares de simulação

Horário: 19 de março (sexta-feira) – 14:00 às 16:00 horas

Prof. Ronaldo Junio de Oliveira (DF-UFTM)

AULA 2 – INTRODUÇÃO DE DINÂMICA MOLECULAR II

Tutorial de simulação computacional de um sistema biomolecular simples

Horário: 26 de março (sexta-feira) – 14:00 às 16:00 horas

Prof. Ronaldo Junio de Oliveira (DF-UFTM)

AULA 3 – TÉCNICAS AVANÇADAS DE DINÂMICA MOLECULAR I

Parametrização de pequenas moléculas e compostos

Dinâmica molecular da interação entre proteínas/enzimas e pequenos compostos

Horário: 09 de abril (sexta-feira) – 14:00 às 16:00 horas

Prof. Alexandre de Araujo Suman (DF-UNESP)

AULA 4 – TÉCNICAS AVANÇADAS DE DINÂMICA MOLECULAR II

Análise das interações da dinâmica entre proteína e ligante

Horário: 16 de abril (sexta-feira) – 14:00 às 16:00 horas

Prof. Alexandre de Araujo Suman (DF-UNESP)

AULA 5 – SIMULAÇÃO DE MODELOS SIMPLIFICADOS DE BIOMOLÉCULAS

Modelo baseado na estrutura usando o pacote SMOG

Simulação do processo de envelhecimento da proteína CI2

Horário: 23 de abril (sexta-feira) – 14:00 às 16:00 horas

Prof. Frederico Campos Freitas (DF-UFTM)

AULA 6 – TÉCNICAS DE ANÁLISE DE SIMULAÇÕES DE BIOMOLÉCULAS

Introdução à linguagem de programação Python

Análise cinética e termodinâmica por cadeias de Markov e *machine learning*.

Horário: 30 de abril (sexta-feira) – 14:00 às 16:00 horas

Prof. Frederico Campos Freitas (DF-UFTM)

AULA 7 – SIMULAÇÃO COM POTENCIAIS HÍBRIDOS QM/MM – Aula I

Elementos de química quântica;

Introdução aos potenciais híbridos de química quântica e mecânica molecular (QM/MM), com exemplos simples na biblioteca pDynamo.

Horário: 07 de maio (sexta-feira) – 14:00 às 16:00 horas

Prof. Guilherme Menegon Arantes (IQ-USP)

AULA 8 – SIMULAÇÃO COM POTENCIAIS HÍBRIDOS QM/MM – Aula II

Cálculo de deslocamento químico usando química quântica;

Preparação de sistemas proteicos com a biblioteca pDynamo e cálculo de deslocamento químico de grupos proteicos.

Horário: 14 de maio (sexta-feira) – 14:00 às 16:00 horas

Prof. Guilherme Menegon Arantes (IQ-USP)

BIBLIOGRAFIA

1. Gromacs. <http://gromacs.org>
2. Drigo Filho, Elso (Org). Métodos Computacionais no Estudo de Macromoléculas Biológicas. Editora Livraria da Física. São Paulo. 2019
3. Noel, Jeffrey K. et al. SMOG 2: a versatile software package for generating structure-based models. PLoS computational biology, v. 12, n. 3, p. e1004794, 2016.
4. Scherer, Martin K. et al. PyEMMA 2: A software package for estimation, validation, and analysis of Markov models. Journal of chemical theory and computation, v. 11, n. 11, p. 5525-5542, 2015.
5. A Practical Introduction to the Simulation of Molecular Systems. Martin J. Field, Cambridge Press, 2a edição.
6. Senn HM, Thiel W (2009). "QM/MM methods for biomolecular systems". Angewandte Chemie. 48 (7): 1198–229.