

# ESCOLA BRASILEIRA DE RMN - **CURSO ONLINE**

## TEÓRICO-PRÁTICO DE DINÂMICA DE PROTEÍNAS POR RMN

### PROFESSORES:

Fabio Almeida (CNRMN-UFRJ)

Adolfo Henrique de Moraes (ICEX-UFMG)

Ramon Pinheiro-Aguiar (CNRMN-UFRJ)

**DATA:** 12/06/2023 até 07/07/2023 (segundas-feiras, quartas-feiras e sextas-feiras)

**HORÁRIO:** 13:00 -17:00h

**DATA LIMITE PARA A INSCRIÇÃO:** 22/05/2023

**LIMITE DE VAGAS:** não há

**VALORES:** R\$ 75,00 (sócios); R\$ 300,00 (não-sócios)

**PRÉ-REQUISITO RECOMENDADO:** não há

### **INSCRIÇÕES ABERTAS ATÉ 22/05/2023:**

<https://eventos.galoa.com.br/dinamicadeproteinas-rmn-2023/registration>

**OBJETIVOS:** O objetivo deste curso é abordar os princípios básicos de relaxação do spin nuclear e o seu uso para a medida de dinâmica de proteína, ressaltando as aplicações e avanços científicos em biologia estrutural proporcionados pelo uso destes métodos. Introduzir os mecanismos e as funções de correlação e densidade espectral e a estratégia utilizada para as medidas de experimentais de relaxação e o tratamento teórico da dinâmica rápida (ps-ns) através do formalismo de Lipari-Szabo. Abordaremos a dinâmica de proteínas e outras macromoléculas em aulas práticas que fazem uso dos parâmetros de relaxação T1, T2, NOE e o tratamento teórico via Lipari-Szabo. Serão abordadas as medidas quantitativas de dinâmica lenta ( $\mu$ s-ms) através dos experimentos de dispersão de relaxação e transferência de saturação por troca conformacional (CEST). Abordaremos o tratamento teórico de troca química e conformacional utilizando a equação de Bloch-McConnell.

## **PROGRAMA**

- 1 Introdução à relaxação do spin nuclear
2. Equações de Bloch
3. Equações de Solomons
4. Função de correlação e densidade espectral.
5. Mecanismos de Relaxação
6. Efeito Nuclear Overhauser
7. Parâmetros de relaxação - T1 e T2
8. Troca química e conformacional/equação de Bloch McConnell.
9. Dispersão de relaxação via CPMG
10. Transferência de saturação via troca conformacional - CEST
11. Lipari-Szabo model free formalism

## **CRONOGRAMA:**

- 12/06 (Seg) – Vetores e equações de Bloch (Fabio)
- 14/06 (Qua) – Introdução à relaxação (Adolfo)
- 16/06 (Sex) – Equações de Solomons (Adolfo) - NOE
- 19/06 (Seg) – Dinâmica rápida – pico a nano segundos (teórica) (Adolfo/Fabio)
- 21/06 (Qua) – Processamento de espectros (NMRPipe)
- 23/06 (Sex) – Dinâmica rápida – Lipari-Szabo (prática) (Ramon)
- 26/06 (Seg) – Dinâmica rápida – Lipari-Szabo (prática) (Ramon)
- 28/06 (Qua) - Dinâmica Lenta – micro a mili segundos (teórica) – R1rho/CPMG/CEST (Adolfo/Fabio)
- 30/06 (Sex) - Dinâmica Lenta – micro a mili segundos (prática) – CPMG (Ramon)
- 03/07 (Seg) - Dinâmica Lenta – micro a mili segundos (prática) – CEST (Ramon)
- 05/07 (Qua) – Avaliação – apresentação de papers
- 07/07 (Sex) - Avaliação – apresentação de papers

**INFORMAÇÕES: [administrativo@auremn.org](mailto:administrativo@auremn.org)**