

QBQ2505 e QBQ5758 - Biologia Estrutural - 2023

Início: 14 de Março - **Término:** 29 de Junho

Local: Sala 0612 – B6 inferior

Horário: Terças-feiras 14:00 - 15:40 e quintas-feiras 10:00 - 11:40

Professores:

Roberto K. Salinas (Bloco 10-S, sala 1052, roberto@iq.usp.br)

Sandro R. Marana (Bloco 12-I, sala 1212, srmarana@iq.usp.br)

Shaker Chuck Farah (Bloco 0-I, sala 05, chsfarah@iq.usp.br)

Programa:

Folding de proteínas, cooperatividade e alosteria; aplicações de ressonância magnética nuclear (RMN) multidimensional heteronuclear em biologia estrutural, resolução de estruturas de proteínas por difração de raios-X (cristalografia), criomicroscopia eletrônica, simulações computacionais por dinâmica molecular.

Organização:

Aulas teóricas, exercícios, apresentação e discussão de artigos científicos.

Avaliação:

Será composta por exercícios, apresentação oral de um artigo científico, e prova final.

Exercícios:

Listas de exercícios serão distribuídas para complementar e reforçar conceitos tratados em aula.

Apresentações:

As apresentações serão preparadas em grupo. Espera-se que todos os alunos participem da discussão durante as apresentações.

Prova:

A prova final avaliará o conteúdo de toda a disciplina.

Cálculo da média final:

Média final = 0.50 (Prova final) + 0.50 (apresentação + exercícios)

Critério de aprovação:

Média final maior ou igual a 5,0 e frequência maior ou igual à mínima exigida pelo Conselho de Graduação da USP.

Bibliografia:

1. Rhodes, G., Crystallography Made Crystal Clear, 3^a ed., Academic Press (2006)
2. Rupp, B., Biomolecular Crystallography: Principles, Practice, and Application to Structural Biology (2009)
3. Fersht, A., Structure and Mechanism in Protein Science, 1^a ed. W. H. Freeman and Company (1999)
4. Branden, C. and Tooze, J., Introduction to Protein Structure, 2^a ed. Garland Publishing Inc. (1999)

5. Lijas, A., Liljas, L., Piskur, J., Lindblom, G., Nissen, P., Kjeldgaard, M. A Textbook of Structural Biology, World Scientific Publishing Co. (2009)
6. Voet, D. and Voet, J. G., Biochemistry, 4^a. ed. John Wiley & Sons Inc. (2011)
7. Creighton, T. Proteins 2nd Edition, Freeman& Co. (1993)
8. Dill, K.A., Bromberg, S., Stigter, D., Molecular Driving Forces, 1^a edição, Garland Science (2002)
9. van Holde, K.E., Johnson, W.C., Shing Ho, P., Principles of Physical Biochemistry, 2a edição, Pearson Prentice Hall (2006)
10. Campbell, I.D. Biophysical Techniques, Oxford University Press (2012)
11. Cavanagh, J., Skelton N., Fairbrother W., Rance M., e Palmer A. Protein NMR Spectroscopy, 2a edição, Academic Press (2007)
12. Wüthrich, K., NMR of Proteins and Nucleic Acids, 1a ed. John Wiley & Sons (1986)
13. Hore, P.J., Nuclear Magnetic Resonance, Oxford Chemistry Primer 32, Oxford University Press (1995)
14. Vranken et al. (2014) NMR-based modelling and refinement of protein 3D structures. In Methods in Molecular Biology: Molecular Modelling of Proteins (Ed. Andreas Kukol, Humana Press Inc.)
15. Leach, A. R., Molecular Modelling: Principles and Applications, 2a ed., Pearson-Prentice Hall (2001)
16. Field, M. A Practical Introduction to the Simulation of Molecular Systems, 2a edição, Cambridge University Press (2007)

PROGRAMA
(pode sofrer modificações ao longo da disciplina)

Data	Prof.	Tópicos
14.03	<i>Sandro</i>	Informações gerais sobre a disciplina <i>Folding</i> e estabilidade de proteínas - Famílias de proteínas
16.03	<i>Sandro</i>	A base estrutural de propriedades funcionais em proteínas
21.03	<i>Chuck</i>	Cristalografia de macromoléculas: A natureza de cristais proteicos e simetria Princípios geométricos de difração <i>"Crystallography made Crystal Clear"</i> de <i>Gale Rhodes</i>
23.03	<i>Chuck</i>	Prática: Programas de visualização molecular e conjuntos de dados de difração de raios X de proteínas
28.03	<i>Sandro</i>	<i>Folding</i> e estabilidade de proteínas
30.03	<i>Roberto</i>	Tutorial sobre programas de visualização de estruturas de proteínas
04.04		Feriado
06.04		Feriado
11.04	<i>Chuck</i>	Cristalografia de macromoléculas: Resolução das fases, Refinamento e Validação do modelo molecular
13.04	<i>Chuck</i>	Prática de cristalografia e introdução à Cryo-EM (criomicroscopia eletrônica) de proteínas
18.04	<i>Roberto</i>	Probabilidades e entropia
20.04	<i>Roberto</i>	Lei de distribuição de Boltzmann, superfícies de energia livre, e dinâmica de proteínas
25.04	<i>Roberto</i>	Exercícios em sala
27.04	<i>Roberto</i>	Proteínas intrinsecamente desordenadas versus proteínas enoveladas
02.05	<i>Roberto</i>	Exercícios em sala
04.05	<i>Roberto</i>	Ressonância magnética nuclear: Equação de Bloch
09.05	<i>Roberto</i>	RMN de proteínas
11.05	<i>Roberto</i>	Exercícios em sala
16.05	<i>Roberto</i>	Simulações computacionais: mecânica molecular
18.05	<i>Roberto</i>	Simulações de dinâmica molecular
23.05	<i>Roberto</i>	Cálculo de estruturas de proteínas a partir de dados de RMN
25.05	<i>Roberto</i>	Exercícios em sala
30.05	<i>Sandro</i>	SAXS (espalhamento de raios-X em baixos ângulos) de proteínas
01.06	<i>Sandro</i>	Predição de estruturas proteicas usando alinhamentos de múltiplas
06.06		Reunião da SBBq
08.06		Feriado
13.06	<i>Sandro</i>	Prática: AlphaFold e RosettaFold
15.06		Data livre para preparação das apresentações
20.06		Apresentação de trabalhos
22.06		Apresentação de trabalhos
27.06		Aula de discussão de dúvidas
29.06		Prova final