

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, 2^a 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, 2^a edição, Academic Press (2007)
12. Wüthrich, K., NMR of Proteins and Nucleic Acids, 1^a 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, 2^a ed., Pearson-Prentice Hall (2001)
16. Field, M. A Practical Introduction to the Simulation of Molecular Systems, 2^a 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>Chuck</i>	Cristalografia de macromoléculas: Resolução das fases
30.03	<i>Chuck</i>	Prática: Cálculo do primeiro mapa de densidade eletrônica e 1º modelo molecular
04.04		Feriado
06.04		Feriado
11.04	<i>Chuck</i>	Cristalografia de macromoléculas: Refinamento e Validação do modelo molecular
13.04	<i>Chuck</i>	Cryo-EM (criomicroscopia eletrônica) de proteínas
18.04	<i>Roberto</i>	Entropia e distribuição de probabilidades
20.04	<i>Roberto</i>	Lei de distribuição de boltzmann Superfícies de energia livre, folding e dinâmica de proteínas
25.04	<i>Roberto</i>	Superfícies de energia livre, folding e dinâmica de proteínas
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