

PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM QUÍMICA
SEMINÁRIOS

2020/1 – PPGQ / SEM I e II

DATA:

10/06/20

PALESTRANTE:

Prof. Dr. Leandro Martínez [Currículo Lattes]

INSTITUIÇÃO:

UNICAMP – Universidade Estadual de Campinas (Instituto de Química)

TÍTULO DA PALESTRA:

Modelagem da estrutura de proteínas usando espectrometria de massas.

RESUMO:

Determinar a estrutura de uma proteína é um desafio que envolve técnicas experimentais e computacionais. O desenvolvimento de métodos rápidos de sequenciamento de genes fez com que a informação genética ultrapassasse em muito a capacidade da proteômica experimental de determinar as estruturas das proteínas correspondentes. Recentemente, avanços em uma nova estratégia experimental, a espectrometria de massas de ligações cruzadas, permitiram que informações estruturais fossem obtidas da estrutura tridimensional de proteínas com protocolos experimentais rápidos e simples. No entanto, a informação estrutural é ruidosa e, ainda, resultante de múltiplas estruturas em solução, não necessariamente consistentes com uma única estrutura funcional representativa do conjunto. Neste seminário, discutiremos metodologias computacionais que desenvolvemos para lidar com estas restrições experimentais na modelagem da estrutura de proteínas. Abordaremos o problema da qualidade da informação experimental, da sua complexidade química e estrutural, e, também, como a variabilidade conformacional da proteína em solução afeta os métodos de modelagem e a definição de uma estrutura funcional.