

Colóquio

“Synergy between NMR, cryo-EM and large-scale MD simulations - An all atom model of a native HIV capsid”

Profa. Angela M. Gronenborn
Universidade de Pittsburgh
19 de outubro, quinta-feira, Auditório Abrahão de Moares, às 16h

HIV entry into the cell entails a derailment of the normal host defense pathways, rendering HIV resistant to cell-mediated destruction responses. In the virion, the viral RNA genome is enclosed and protected by a conical-shaped capsid core. Structural analysis by NMR and cryoEM, in combination with large-scale MD simulation permitted the construction of a realistic all-atom model for the entire capsid, based on the 3D authentic core structure.

ABOUT THE SPEAKER: A native of Colony, Germany, Gronenborn received her undergraduate degree in 1975 and her Ph.D. in physical chemistry in 1978, both from the University of Cologne. During her graduate work she became interested in the then-young field of nuclear magnetic resonance spectroscopy applied to biological macromolecules. She did postdoctoral work with protein NMR pioneer James Feeney at the National Institute for Medical Research in London, where she met fellow spectroscopist and longtime collaborator Marius Clore. Gronenborn and Clore moved in 1984 to the Max Planck Institute and in 1988 to the National Institute of Diabetes and Digestive and Kidney Diseases, part of the United States National Institutes of Health, to which they were recruited in part to assist efforts in studying HIV and HIV-related proteins. Gronenborn and Clore, along with Ad Bax and Dennis Torchia, made significant advances in three-dimensional protein NMR during this period. In 2004 Gronenborn moved to the University of Pittsburgh to head its department of structural biology, where she has remained since.

Transmissão via IPTV – <http://www.iptv.usp.br>

Seminário do Grupo de Física Estatística – FGE

“Sistemas Liotrópicos: Física + Química”

Profa. Dra. Lia Queiroz do Amaral
Departamento de Física Aplicada – IFUSP
18 de outubro, quarta-feira, Sala 201
Ala 1, Sala de Seminários, às 14h

Sistemas liotrópicos são soluções aquosas que apresentam auto organização pelo “efeito hidrofóbico”. São misturas de água com moléculas anfifílicas (com uma parte polar solúvel em água e uma parte apolar insolúvel em água) e vários tipos de aditivos. Os anfifílicos mais comuns são sabões e detergentes, de grande interesse por suas propriedades de solubilização, e também os lipídeos das membranas biológicas. Em bioquímica costumam ser estudados em baixa concentração, focalizando a formação de micelas e vesículas a partir de uma concentração micelar crítica, e acima da temperatura crítica Krafft de micelização. Em altas concentrações formam-se agregados de formas variáveis, os cristais líquidos liotrópicos, com transições de fase por mudanças da concentração relativa de seus componentes, mas também da temperatura. Focalizamos neste seminário a fascinante variedade de fases existentes nesses sistemas, estudados no IFUSP há 43 anos. Discutimos uma teoria fenomenológica baseada na energia elástica das interfaces polar / apolar, e na frustração geométrica de interações competitivas.



Dissertações e Teses de Doutorado

Dissertação de Mestrado

Harold Alberto Rojas Páez

"Caracterização da amplificação paramétrica no processo de mistura de quatro ondas na configuração duplo- Λ em vapor de Rubídio"

Comissão Examinadora:

Profs. Drs. Marcelo Martinelli (orientador - IF/USP), Ricardo Elgul Samad (IPEN) e Daniel Felinto Pires Barbosa (UFPE).

Comunicado da Assessoria de Imprensa do IFUSP

Artigo publicado na prestigiosa revista *Physical Review B*:

"Single vacancy defect in graphene: Insights into its magnetic properties from theoretical modeling"

A. M. Valencia and M. J. Caldas Instituto de Física, Universidade de São Paulo

Abstract: O artigo publicado vem de pesquisa teórica realizada durante o trabalho de doutoramento de Ana Maria Valencia, sob orientação de Marília J. Caldas, tendo sido a tese recentemente apresentada. Trata-se de um tema de longa discussão entre a comunidade que estuda defeitos em grafeno: será a vacância (ausência de um átomo de carbono da rede) responsável por um momento magnético forte, fraco? Quanto será forte a interação entre vacâncias? Havia divergência de longa data nos resultados teóricos apresentados por pesquisadores renomados de vários institutos internacionais. Os resultados apresentados pela dupla do IFUSP explicam a razão das divergências anteriores, colocando ênfase na escolha dos métodos de simulação (de primeiros princípios). A figura destacada pelo "Kaleidoscopes" da revista *Physical Review B* ilustra a reconstrução estrutural realizada pelos átomos vizinhos à vacância, na forma mais simples conhecida como "ball-and-stick", e se torna visualmente tão bonita graças à simetria hexagonal do material-base: novamente, o grafeno é material interessantíssimo e particularmente especial.

Dados do artigo:

PHYSICAL REVIEW B 96, 125431 (2017) Single vacancy defect in graphene: Insights into its magnetic properties from theoretical modeling A. M. Valencia and M. J. Caldas Instituto de Física, Universidade de São Paulo.

Link para Kaleidoscopes <https://journals.aps.org/prb/kaleidoscope/September2017>

Link para a figura do artigo <https://journals.aps.org/prb/kaleidoscope/prb/96/12/125431>

Comunicado do Departamento de Física Aplicada – FAP

I Escola de Ciência Avançada da FAPESP

I Escola de Ciência Avançada da FAPESP "Biophysical Methods to Study Biomolecular Interactions" será realizada no IFUSP, de 16 a 26 de outubro de 2017, no auditório Abrahão de Moraes. Trata-se de uma escola internacional na área de Biofísica Molecular com participação de 135 alunos, sendo 70 de outros países. O programa contempla aulas teóricas em diversas técnicas e temas relevantes e de fronteira na área de Biofísica, com renomados pesquisadores, e também aulas práticas e apresentação de painéis pelos alunos.



Programa

	Monday, Oct 16th	Tuesday, Oct 17th	Wednesday, Oct 18th	Thursday, Oct 19th	Friday, Oct 20th		Monday, Oct 23th	Tuesday, Oct 24th	Wednesday, Oct 25th	Thursday, Oct 26th	Friday, Oct 27th
7h30-8h15	Registration										
8h15-9h00	Opening										
9h00-10h30	L1. Opening Lecturer: Membrane biophysics: Principles and methodologies for the study of phases and lipid domains. The effect of cholesterol. Manuel Prieto	L5. Introduction to Cryo-Electron Microscopy, with key application examples. Jose Maria Carazo	L7. Biological and biomedical applications of atomic force microscopy. Nuno Santos	FAPESP: Luiz Nunes	L12. The awesome power of Fluorine NMR – ligand binding, PRs and other applications. Angela M. Gronenborn		9h00-10h30	L12. Basic Computational approaches in biomolecular simulations: protein folding and protein assembly. Yaakov Levy	Travel to Campinas (CNPEM) from 8h00	L16 CD spectroscopy: membrane proteins and drug interactions. Bonnie Wallace	ESPCA/SBBf meeting* BioNMR Symposium
10h30-10h50	Coffee Break	Coffee Break	Coffee Break	Coffee Break	Coffee Break		10h30-10h50	Coffee Break	Visit CNPEM - LNLS – LNBio-LN Nano	Coffee Break	Coffee Break
10h50-12h20	L2. Membrane SAXS: basic principles and applications. Rosangela Itri	L6. Computing cryo-EM maps: The image processing workflow to go from 2D to 3D. Jose M. Carazo	L8. SAXS from proteins and protein-membrane interaction. Leandro RS Barbosa Merck Presentation (11h50): Duolink: Protein Interaction using PLA (Proximity Ligation Assay). Paola Braga	L9. Advanced fluorescence methodologies applied to lipid-protein interaction: Time-resolved data, FRET, anisotropy and microscopy. Manuel Prieto	Hands-on SAXS EPR DLS/NTA Thermoforesis		10h50-12h20	L13. Biomolecular NMR. Christina Redfield	L17. Assignment of Protein NMR Spectra. Christina Redfield	Poster Session II	Cell Biophysics Symposium-
12h20-14h00	Lunch	Lunch	Lunch	Lunch	Lunch		12h20-14h00	Lunch	Lunch at CNPEM	Lunch	Lunch
14h00-15h30	L3. Electron Spin Resonance: Theory and Biophysical Applications. Antonio Jose da Costa Filho	Hands-on Cryo-EM SAXS EPR DLS/NTA	Hands-on Cryo-EM SAXS EPR DLS/NTA	Hands-on DLS/NTA Thermoforesis	Hands-on SAXS EPR DLS/NTA Thermoforesis		14h00-15h30	L14 Introduction to Molecular Dynamic Simulations of Membranes (Part I). Kaline Coutinho	Visit CNPEM - LNLS – LNBio-LN Nano	Hands-on NMR and CD	L18. Introduction to Molecular Dynamic Simulations of Membranes (Part II). Kaline Coutinho
15h30-16h00	Coffee Break					Coffee Break	15h30-16h00	Coffee Break			
16h00-17h30	L4. AFM-based force spectroscopy. Nuno Santos			L10. Synergy between NMR, cryo-EM and large-scale MD simulations - An all atom model of a native HIV capsid. Angela M. Gronenborn	Poster Session I with Coffee Break		16h00-17h30	L15. CD spectroscopy: basic principles and applications to proteins (including peptides and IDPs). Robert Janes	Travel back to SP	L19 Molecular principles for optimizing protein-DNA interactions. Yaakov Levy	17h30 – 1830 Multiple spectroscopies for studying the exquisite nature of signaling in biology – exploiting membrane proteins. Anthony Watts
17h30-18h30	Welcome Cocktail			Hands-on Thermoforesis			18h00			Travel to Santos	

ATIVIDADES DA SEMANA

4ª. FEIRA, 18.10.17

• Seminário do Grupo de Física Estatística – FGE

“Sistemas Liotrópicos: Física + Química”
Profa. Dra. Lia Queiroz do Amaral
Departamento de Física Aplicada – IFUSP
Sala 201, Ala 1, Sala de Seminários, às 14h

5ª. FEIRA, 19.10.17

• Colóquio

“Synergy between NMR, cryo-EM and large-scale MD simulations - An all atom model of a native HIV capsid”
Profa. Angela M. Gronenborn
Universidade de Pittsburgh
Auditório Abrahão de Moares, 16h

6ª. FEIRA, 20.10.17

• Seminário do INCT/NAP/GFCx

“Caracterização Estrutural e Termodinâmica da Interação Mioglobina-Surfactantes - Parte II”
Pedro Leonidas Oseliero Filho, Aluno do GFCx
Auditório Adma Jafet, às 15h

BIFUSP

Uma publicação semanal do Instituto de Física da USP

Editor: Prof. Dr. Fernando Tadeu Caldeira Brandt

Secretário: Iran Mamedes de Amorim

Textos e informações assinados são de responsabilidade de seus autores.

São divulgadas no BIFUSP as notícias encaminhadas até 4ª feira, às 12h, impreterivelmente.

Tel.: 3091-6900 - E-mail: bifusp@if.usp.br - Homepage: www.if.usp.br

