



E0390

CÁLCULO DE GEOMETRIA MOLECULAR

Thársis Tuani Pinto Souza (Bolsista FAPESP) e Profa. Dra. Carlile Campos Lavor (Orientadora), Instituto de Matemática, Estatística e Computação Científica - IMECC, UNICAMP

Desde a descoberta da estrutura tridimensional da molécula de DNA a recentes inibidores patológicos, o estudo de predição de estruturas tridimensionais moleculares vem mostrando-se de fundamental importância. Com esta motivação, este projeto objetiva o estudo do cálculo de geometria molecular, relacionado ao "Molecular Distance Geometry Problem" (MDGP). Este problema está associado a uma técnica utilizada para o cálculo de estruturas de proteínas chamada Ressonância Magnética Nuclear (RMN), que fornece as distâncias entre átomos próximos da molécula de proteína. O problema é, então, determinar as coordenadas cartesianas de todos os átomos da molécula usando apenas as distâncias obtidas por RMN. Implementamos um algoritmo para o problema e já temos alguns resultados computacionais preliminares.

Ressonância magnética nuclear - Geometria molecular - Molecular distance geometry problem