

Universidade Federal de Juiz de Fora
Programa de Pós-graduação em Modelagem Computacional
Plano de Curso (ERE - Ensino Remoto Emergencial)

Disciplina: 219032 - TÓPICOS AVANÇADOS EM BIOLOGIA COMPUTACIONAL

Período: 2022-3

Professora: Priscila Vanessa Zabala Capriles Goliatt

Horário:

Aula Presencial: Segundas e Quintas de 16h00 às 18h00

Aula Assíncrona: Terças, Quartas e Sextas (Atividades práticas e desenvolvimento dos trabalhos)

Início: 24 de Outubro de 2022

Término: 28 de Novembro de 2022

Total: 23 dias

E-mail: capriles@ice.ufjf.br

Atendimento: Presencialmente ou por vídeo chamada em horário acordado com o discente.

Procedimentos didáticos:

Aulas expositivas e de atividades presenciais e assíncronas;

Material de aulas expositivas, de consulta e de exercícios;

Avaliações.

Avaliação do Curso:

Atividades práticas (20%);

Apresentação de Proposta de Trabalho (20%);

Relatório Final (30%);

Apresentação de Trabalho Final (30%).

Cronograma e Conteúdo do Curso:

Semana I e II:

0-Recepção aos alunos e discussão sobre seus temas de pesquisa;

1-Introdução à bioinformática e biologia computacional;

2-Predição de estrutura tridimensional (3D) de proteínas;

3-Avaliação da qualidade de modelos 3D.

Semana III e IV:

4-Apresentação das propostas de trabalho da disciplina;

5-*Docking* proteína-ligante;

6-Avaliação de afinidade e modo de ligação.

Semana V:

7-Desenvolvimento dos Trabalhos;

8-Introdução à dinâmica molecular de proteínas.

Semana VI:

9-Apresentação dos Trabalhos Finais;

10-Entrega dos Relatórios Finais.

Bibliografia:

- 1) Verli, Hugo. Bioinformática: da Biologia à Flexibilidade Molecular. 1 ed. São Paulo: Sociedade Brasileira de Bioquímica e Biologia Molecular - SBBq, 2014. ISBN: 9788569288008, URL: <http://hdl.handle.net/10183/166105> .
- 2) Nelson, D.L. & Cox, M.M. Princípios de Bioquímica de Lehninger. 6aed. Editora Artmed, 2014.
- 3) Leach, Andrew. Molecular Modeling – Principles and Applications, 2nd Ed., 2001
- 4) Schlick, Tamar. Molecular Modeling and Simulation, 2nd Ed., 2010
- 5) Artigos e Periódicos da área.

Requisitos Computacionais Instalados: PyMol, VMD, Modeller, AutoDock Vina, Kate.