

Universidade Federal de Juiz de Fora  
Programa de Pós-graduação em Modelagem Computacional

**Disciplina: 219032 - TÓPICOS AVANÇADOS EM BIOLOGIA COMPUTACIONAL**

Período: 2023-2

Professora: Priscila Vanessa Zabala Capriles Goliatt

Horário:

Aula Presencial: Sexta de 08h às 12h

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

Início: 11 de Agosto de 2023

Término: 06 de Setembro de 2023

E-mail: [capriles@ice.ufjf.br](mailto: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 (Carga horária: 4h):**

Recepção aos alunos e discussão sobre seus temas de pesquisa;

Introdução à bioinformática e biologia computacional;

Predição de estrutura tridimensional (3D) de proteínas;

**Semana II (Carga horária: 12h):**

Apresentação das propostas de trabalho da disciplina;

Modelagem de estrutura tridimensional (3D) de ligantes;

Avaliação da qualidade de modelos 3D (proteínas e ligantes).

**Semana III (Carga horária: 12h):**

Desenvolvimento Computacional dos Temas das Propostas de Trabalho.

*Docking* proteína-ligante;

Avaliação de afinidade e modo de ligação.

**Semana IV (Carga horária: 12h):**

Desenvolvimento Computacional dos Temas das Propostas de Trabalho.

Apresentação de Trabalho Final.

**Semana V (Carga horária: 5h):**

Entrega do Relatório Final;

**Bibliografia:**

1) Verli, H.; et al (2014). "Bioinformática: da biologia à flexibilidade molecular". SBBq. Disponível em:

<https://lume.ufrgs.br/bitstream/handle/10183/166105/001012172.pdf?sequence=1&isAllowed=y>

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.