

**PROGRAMA DE DISCIPLINA**

Programa:	Pós-Graduação em Ciências Biológicas		
Departamento:	Departamento de Bioquímica		
Centro:	Ciências Biológicas		
COMPONENTE CURRICULAR			
Nome da Disciplina: Bioinformática aplicada ao estudo da interação proteína-ligante		Código:	
Tipo: Eletiva			
Carga Horária Teórica: 15h		Carga Horária Prática: 30h	Carga horária total: 45h
Nº de créditos teóricos: 1		Nº de créditos práticos: 1	Nº total de créditos: 2
Nível: Mestrado e doutorado			
Ano de Implantação: 2022			
Idioma em que a disciplina será oferecida: Português			
1. EMENTA			
Fornecer conhecimentos sobre métodos de bioinformática aplicados ao estudo da interação molecular entre proteína e ligante.			
2. OBJETIVOS			
Aprender a utilizar ferramentas e protocolos computacionais de modelagem molecular e seleção de ligantes com maior afinidade por uma proteína-alvo.			
3. CONTEÚDO PROGRAMÁTICO			
<ul style="list-style-type: none">• Interações moleculares;• Estrutura tridimensional de proteínas;• Modelagem de moléculas e biomacromoléculas;• Preparo de bibliotecas virtuais de moléculas: aplicações de filtros <i>in silico</i> seguindo as Regras de Lipinski;• Simulações de ancoragem molecular (<i>Docking molecular</i>);• Validação de protocolos de <i>Docking molecular</i> (<i>Redocking</i>);• Simulações para minimização de energia;• Renderização de figuras proteína-ligante para publicação;			
4. CRITÉRIO DE AVALIAÇÃO			
Avaliação única: teórica			
5. REFERÊNCIAS			
<ul style="list-style-type: none">• VERLI, H. (Org.). <i>Bioinformática da Biologia à Flexibilidade Molecular</i>. 1ª edição: SBBq, 2014. (http://www.ufrgs.br/bioinfo/ebook/)• KESSEL, A.; BEN-TAL, N. <i>Introduction to Proteins Structure, Function, and Motion</i>. 2nd edition: CRC Press, 2018.• GU, J.; BOURNE P. E. <i>Structural Bioinformatics</i>. 2nd edition. Wiley-Blackwell, 2009.• Outras referências: Artigos científicos e tutoriais serão indicados durante a disciplina.			
6. PROFESSOR RESPONSÁVEL			
Paulo Sérgio Alves Bueno			