



Universidade Estadual de Maringá

Programa de Pós-Graduação em Ciências Biológicas



DBQ4068 – BIOQUÍMICA E BIOFÍSICA COMPUTACIONAL

Carga Horária: 60 h/a - 4 créditos (30 h/a teóricas - 2C e 30 h/a prática – 2C)

Ementa: Fundamentação dos métodos computacionais voltados à análise termodinâmica de sistemas macromoleculares e sua interação com ligantes.

Programa: Introdução a computação em paralelo. Visualização da estrutura das proteínas e técnicas de renderização. Métodos interativos e automáticos de modelagem molecular baseados em homologia. Métodos de validação e seleção de modelos estruturais. Introdução aos métodos de simulação de dinâmica molecular: *softwares* utilizados, simulações para minimização de energia e equilíbrio termodinâmico, condições de contorno periódicas, controle de temperatura e pressão, solventes. Campos de força e parametrização. Introdução aos métodos de análise da dinâmica molecular (rmsd, rmsf, raio de giro, frequências de contato e pontes de H). Métodos computacionais para varredura virtual em bancos de dados de compostos químicos, *drug discovery* e *docking* molecular. Métodos para pós-seleção de candidatos a inibidores: $\Delta G_{\text{binding}}$, K_i , Métodos de pontuação, filtros ADMETox.

Bibliografia:

LEACH, A. R. Molecular Modelling: Principles and Applications. 2nd edition. Prentice Hall, 2001, 784 p.

SCHLICK, T. Molecular Modeling and Simulation. Springer; 1 edition, 2002, 656 p.

MARX, D. *Ab Initio* Molecular Dynamics: Basic Theory and Advanced Methods. 1st edition. Cambridge University Press, 2009, 578 p.

GU, J.; BOURNE P. E. Structural Bioinformatics. 2nd edition. Wiley-Blackwell, 2009, 1067 p.

Tutoriais serão desenvolvidos e Artigos de periódicos serão discutidos durante a disciplina.