



PROGRAMA DE DISCIPLINA

Programa:	Pós-Graduação em Ciências Biológicas	
Departamento:	Bioquímica	
Centro:	Ciências Biológicas	
COMPONENTE CURRICULAR		
Nome da Disciplina: Bioinformática aplicada ao estudo da interação proteína-ligante		Código: DBQ4125
Tipo: Eletiva		
Carga Horária Teórica: 15h	Carga Horária Prática: 30h	Carga horária total: 45h
Nº de créditos teóricos: 1	Nº de créditos práticos: 2	Nº total de créditos: 3
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		
• 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		
• 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.		