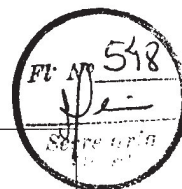




UNIVERSIDADE FEDERAL DE UBERLÂNDIA



## FICHA DE COMPONENTE CURRICULAR

<b>CÓDIGO:</b>	<b>COMPONENTE CURRICULAR:</b> <b>MODELAGEM MOLECULAR</b>	
<b>UNIDADE ACADÊMICA OFERTANTE:</b> <b>INSTITUTO DE GENÉTICA E BIOQUÍMICA</b>	<b>SIGLA:</b> <b>INGEB</b>	
<b>CH TOTAL TEÓRICA:</b> <b>15 horas</b>	<b>CH TOTAL PRÁTICA:</b> <b>15 horas</b>	<b>CH TOTAL:</b> <b>30 horas</b>

### OBJETIVOS

A disciplina tem por objetivo apresentar ao aluno as bases teóricas das principais ferramentas de modelagem molecular utilizadas no estudo de macromoléculas, utilizando para isso os alguns dos principais programas de modelagem molecular utilizados na construção, visualização, análise conformacional, representação e simulação de macromoléculas, destacadamente proteínas.

Ao fim pretende propiciar um novo conjunto de ferramentas aos alunos, possivelmente útil no desenvolvimento de trabalhos de pesquisas futuros.

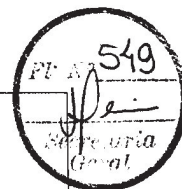
### EMENTA

A disciplina consiste em apresentar aos alunos conceitos sobre estrutura tridimensionais de moléculas biológicas, métodos de elucidação das estruturas protéicas através de técnicas computacionais teóricas. Utilização de programas de visualização e de manipulação de estruturas tridimensionais, como pymol e modeller, etc. Programas online para modelagem de moléculas. Programas para análise de interação proteínas-ligante. Noções básicas sobre o uso de química computacional na previsão de comportamento das moléculas e de design de fármacos.

### PROGRAMA

**Introdução à Modelagem Molecular**

- Definindo Modelagem Molecular



### Fundamentos da estrutura proteica

- Domínios estruturais de proteínas.
- Interações atômicas.
- Métodos experimentais de obtenção de estruturas.

### Visualização molecular

#### Métodos de modelagem molecular

- Modelagem Comparativa ou por homologia.
- Modelagem *ab initio* ou *de novo*.
- Validação de modelos tridimensionais.

#### Proteínas como alvo de drogas

- "Virtual screening".
- Conceitos de espaço químico.
- Predição de interações moleculares receptor-ligante.

## BIBLIOGRAFIA BÁSICA

GU, J. & BOURNE, P.E. **Structural Bioinformatics**. 2nd edition. Hoboken: Wiley-Blackwell, 2009.

RIGDEN, D.J. **From Protein Structure to Function with Bioinformatics**. New York: Springer, 2009.

SCHWEDE, T. & PEITSCH, M. **Computational Structural Biology: Methods and Applications**. New Jersey: World Scientific Publishing Company, 2008.

SOTRIFFER, C. et al. **Virtual Screening: Volume 48 - Principles, Challenges, and Practical Guidelines**. Weinheim: Wiley-VCH, 2011.

## BIBLIOGRAFIA COMPLEMENTAR

WHITFORD, D. **PROTEINS: Structure and Function**. New York: John Wiley & Sons, 2005.

BRANDEN, C. & TOOZE, J. **Introduction To Protein Structure**. 2nd Edition. New York: Garland Science, 2009.

KUKOL, A. **Molecular Modeling Of Proteins**. New York: Humana Press, 2008.

BUJNICKI, J.M. **Prediction Of Protein Structures, Functions, And Interactions**. New York: John Wiley & Sons, 2009.

SUNDSTRÖM, M., NORIN, M., EDWARDS, A. **Structural Genomics And High Throughput Structural Biology**. Boca Raton: Taylor & Francis, 2009.

WU, Z. **Lecture Notes On Computational Structural Biology**. New Jersey: World Scientific



**APROVAÇÃO**

22 / 08 / 2014

Carimbo e assinatura do Coordenador do

**Universidade Federal de Uberlândia**  
**Prof.ª Dr.ª Ana Paula Oliveira Nogueira**  
Coordenadora do Curso de Graduação em Biotecnologia  
Portaria R Nº. 1820/2012

Carimbo e assinatura do Diretor da

Unidade Acadêmica

(que oferece o componente curricular)

**Universidade Federal de Uberlândia**  
Profa. Dra. Sandra Morelli  
Diretora do Instituto de Genética Bioquímica  
Portaria R Nº 1758/2012