



Universidade Federal do Ceará
Pró-Reitoria de Pesquisa e Pós-Graduação
Coordenadoria de Pesquisa e Ensino

FORMULÁRIO PARA CRIAÇÃO DE COMPONENTE CURRICULAR

1. IDENTIFICAÇÃO DO PROGRAMA

Programa Programa de Pós-graduação em Bioquímica

2. TIPO DE COMPONENTE

Atividade () Disciplina (X) Módulo ()

3. NÍVEL

Mestrado (X) Doutorado (X)

4. IDENTIFICAÇÃO DO COMPONENTE

Nome: CIP9022-Introdução à Bioinformática Estrutural

Carga Horária Prática: 16 h

Carga Horária Teórica: 16 h

Nº de Créditos: 2 créditos

Obrigatória: Sim () Não (X)

Área de Concentração:

5. DOCENTE RESPONSÁVEL

Prof. Dr. GEANCARLO ZANATTA

6. JUSTIFICATIVA

- Atualmente métodos de simulação computacional são amplamente utilizados na academia e na indústria para a elucidação estrutural de mecanismos biológicos, bem como na prospeção farmacológica de novos agentes terapêuticos, entre outras áreas. Esta é uma disciplina com caráter introdutório que foca no ensino de técnicas computacionais e na transferência de conhecimentos de bioinformática estrutural utilizados na pesquisa biomédica e básica. Ao longo dos encontros serão discutidos conceitos fundamentais e serão executadas atividades práticas de simulação computacional com foco em ancoramento (atracamento) molecular e dinâmica molecular clássica.

7. OBJETIVOS

- Prover uma visão geral dos principais métodos e ferramentas utilizados em bioinformática estrutural;
- Treinar os(as) estudantes na utilização básica de ferramentas e metodologias de ancoramento molecular;
- Treinar os(as) estudantes na realização e análise de dinâmica molecular de proteínas

8. EMENTA

Computação na nuvem, visualização de arquivos de coordenadas estruturais, correções e ajustes moleculares que antecedem as simulações computacionais, ancoramento molecular, triagem virtual, preparação de dinâmica molecular, execução de dinâmica molecular, análises iniciais de trajetórias

9. PROGRAMA DA DISCIPLINA/ATIVIDADE/MÓDULO

1. Informações gerais sobre a realização das atividades.
Tutorial de instalação de softwares
Introdução a Bioinformática estrutural
2. Recursos computacionais na nuvem e bases de dados. Visualização de proteínas
3. Ancoramento molecular
4. Atividade prática: Ajustes necessários à preparação de proteínas a serem utilizadas no ancoramento molecular
5. Atividade: Ajustes necessários à preparação de pequenas moléculas (substratos/ligantes) a serem utilizadas no ancoramento molecular
6. Atividade prática: Ancoramento molecular utilizando Vina
7. Atividade prática: Ancoramento molecular utilizando Autodock
8. Avaliação prática: Desafio de ancoramento molecular
9. Triagem virtual
10. Seminários (parte 1)
11. Seminários (parte 1)
12. Dinâmica molecular (DM): Teoria
13. Atividade prática: Dinâmica molecular de proteína com o pacote GROMACS
14. Atividade prática: Dinâmica molecular de proteína com o pacote GROMACS
15. Seminários (parte 2)
16. Avaliação teórica e Discussão da disciplina

10. FORMA DE AVALIAÇÃO

Todos devem apresentar frequência mínima de 75% para serem aprovados na disciplina.

Avaliação prática

Cada estudante receberá um desafio de docking e deverá utilizar as ferramentas que estaremos estudando para encontrar a resposta correta.

Seminários

Cada estudante deverá apresentar um seminário versando sobre um determinado tópico da literatura – a ser definido em conjunto professor e os alunos no início da disciplina. Complementarmente, deverá ser gravada uma apresentação de 15 minutos no formato de vídeo. Este vídeo deverá ser enviado para o professor até a data especificada e ficará disponível aos colegas (Google drive) para que todos assistam e discutam. A nota será composta pela apresentação do seminário (presencial e/ou vídeo) (50%) e discussão entre os pares (50%).

Avaliação teórica

Consiste em uma prova com questões de assinalar e/ou escritas onde serão perguntadas questões teóricas abrangendo o conteúdo estudado durante a disciplina.

11. BIBLIOGRAFIA

Bioinformatics in Tropical Disease Research: A Practical and Case-Study Approach (<https://www.ncbi.nlm.nih.gov/books/NBK6824>) – Capítulo 6 - Protein Structure, Modelling and Applications

Bioinformática: da Biologia à Flexibilidade Moleculares. Hugo Verli e colaboradores (<https://www.ufrgs.br/bioinfo/ebook>)

Dinâmica molecular – Manual Gromacs 2021 (<https://manual.gromacs.org/current/reference-manual/index.html>)

Autodock Vina – Manual (<http://vina.scripps.edu/manual.html>)



Documento assinado eletronicamente por **CLEVERSON DINIZ TEIXEIRA DE FREITAS, Coordenador de Curso/Pós-Graduação**, em 30/06/2022, às 08:43, conforme horário oficial de Brasília, com fundamento no art. 6º, § 1º, do [Decreto nº 8.539, de 8 de outubro de 2015](#).



A autenticidade deste documento pode ser conferida no site https://sei.ufc.br/sei/controlador_externo.php?acao=documento_conferir&id_orgao_acesso_externo=0, informando o código verificador **3118434** e o código CRC **CEF586C9**.