



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 PÓS-GRADUAÇÃO EM BIOQUÍMICA

### **2. TIPO DE COMPONENTE**

Atividade ( ) Disciplina (X) Módulo ( )

### **3. NÍVEL**

Mestrado (X) Doutorado (X)

### **4. IDENTIFICAÇÃO DO COMPONENTE**

Nome: CIP7222- Projetos especiais II - 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**

GEANCARLO ZANATTA

### **6. JUSTIFICATIVA**

Esta é uma disciplina de caráter teórico-prática com foco biologia computacional. Visa guiar os estudantes através dos conceitos e aplicações básicas de métodos de bioinformática estrutural, com foco no acesso e manuseio de informações estruturais através de softwares e técnicas específicas

### **7. OBJETIVOS**

- Prover uma visão geral de métodos e ferramentas em bioinformática estrutural;
- Auxiliar os estudantes no desenvolvimento de planejamento estratégico de simulações;
- Treinar os estudantes na utilização da técnica de ancoramento molecular;
- Treinar os estudantes na utilização da técnica de dinâmica molecular

### **8. EMENTA**

Fundamentação teórica dos métodos computacionais utilizados na análise de dados estruturais de proteínas e na investigação das interações do tipo proteína-proteína e proteína-ligante; Modelagem de proteínas; Preparação de proteínas e pequenas moléculas; Análise de protonação de proteínas e de

pequenas moléculas; Princípios básicos na utilização da técnica de ancoramento molecular; Análise de resultados de ancoramento molecular; Princípios básicos na utilização da técnica de dinâmica molecular; Análise de trajetórias.

## 9. PROGRAMA DA DISCIPLINA/ATIVIDADE/MÓDULO

- Informações gerais sobre a realização das atividades remotamente.
- Tutorial de instalação de softwares
- Introdução a Bioinformática estrutural
- Recursos computacionais na nuvem e bases de dados
- Visualização de proteínas
- Ancoramento molecular
- Atividade: Ajustes necessários à preparação de proteínas a serem utilizadas no ancoramento molecular
- Atividade: Ajustes necessários à preparação de pequenas moléculas (substratos/ligantes) a serem utilizadas no ancoramento molecular
- Atividade: Ancoramento molecular utilizando Vina
- Atividade: Ancoramento molecular utilizando Autodock
- Virtual screening utilizando o Autodock Vina
- Desafio de ancoramento molecular
- Preparação de seminários no formato de vídeos
- Fórum de discussão de seminários: todos os estudantes deverão discutir/comentar os seminários de seus colegas
- Dinâmica molecular (DM): Teoria
- Atividade: Dinâmica molecular de proteína com o pacote GROMACS
- Atividade: Análise de dados de dinâmica molecular de proteína com o pacote GROMACS

## 10. FORMA DE AVALIAÇÃO

Avaliações	Formulários de exercícios	50%
Atividade prática (simulação)	Será entregue um desafio de <i>docking</i> a cada estudante e este deverá utilizar as ferramentas em estudo para encontrar a resposta correta.	15%
Seminários	Cada estudante deverá gravar e disponibilizar um vídeo apresentando um determinado tópico da literatura – a ser definido pelo professor na primeira aula. Este vídeo deverá ser enviado para o professor até a data especificada e ficará disponível aos colegas para que assistam e discutam o tema durante a atividade de fórum.	30%
Fórum	Todos os estudantes deverão utilizar a ferramenta de fórum para discutir os assuntos da disciplina, bem como os seminários apresentados (vídeo) pelos colegas.	5%

## 11. BIBLIOGRAFIA

- 2007 - Phytochemical Databases of Chinese Herbal Constituents and Bioactive Plant Compounds with Known Target Specificities.pdf
- 2013 - Perspective on the Martini model.pdf
- 2013 - The Martini coarse-grained force field.pdf
- 2015 - Molecular dynamics simulations- advances and applications.pdf
- 2015 - ZINC 15 - Ligand Discovery for Everyone.pdf
- 2015 - Achievements and challenges in structural bioinformatics and computational biophysics.pdf
- 2015 - PyEMMA 2 A Software Package for Estimation, Validation, and Analysis of Markov Models.pdf
- 2015 - The MMPBSA and MMGBSA methods to estimate ligand-binding affinities.pdf
- 2015 - SANCDB- a South African natural compound database.pdf

- 2016 - 1001 Ways to run AutoDock Vina for virtual screening.pdf  
2017 - NuBBEDB- an updated database to uncover chemical and biological information from Brazilian biodiversity.pdf  
2017 - DINC 2.0- a new protein-peptide docking webserver using an incremental approach.pdf  
2017 - CHARMM-GUI 10 years for biomolecular modeling and simulation.pdf  
2017 - Software for molecular docking- a review.pdf  
2017 - Has Molecular Docking Ever Brought us a Medicine.pdf  
2017 - Structural and Functional View of Polypharmacology.pdf  
2017 - POVME 3.0- Software for Mapping Binding Pocket Flexibility.pdf  
2018 - General Prediction of Peptide-MHC Binding Modes Using Incremental Docking- A Proof of Concept.pdf  
2018 - Ensemble Docking in Drug Discovery.pdf  
2018 - Bridging Molecular Docking to Molecular Dynamics in Exploring Ligand-Protein Recognition Process- An Overview.pdf  
2018 - Is it reliable to take the molecular docking top scoring position as the best solution without considering available structural data.pdf  
2019 - rstoolbox - a Python library for large-scale analysis of computational protein design data and structural bioinformatics.pdf  
2019 - Advances in Enhanced Sampling Molecular Dynamics Simulations for Biomolecules.pdf  
2019 - From Proteins to Perturbed Hamiltonians- A Suite of Tutorials for the GROMACS-2018 Molecular Simulation Package.pdf  
2019 - Steered molecular dynamic simulations of conformational lock of Cu, Zn-superoxide dismutase.pdf  
2020 - A Review on Applications of Computational Methods.pdf  
2020 - Multisecond ligand dissociation dynamics from atomistic simulations.pdf



Documento assinado eletronicamente por **CLEVERSON DINIZ TEIXEIRA DE FREITAS, Coordenador de Pós-Graduação**, em 11/03/2021, às 15:16, 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](https://sei.ufc.br/sei/controlador_externo.php?acao=documento_conferir&id_orgao_acesso_externo=0), informando o código verificador **1837066** e o código CRC **008785BE**.