UNIVERSIDADE DE BRASÍLIA

INSTITUTO DE CIÊNCIAS BIOLÓGICAS

DEPARTAMENTO DE BIOLOGIA CELULAR

DISCIPLINA: 119750 – Modelagem Molecular

CRÉDITOS: 04 – 1 teórico, 3 práticos, 2 estudo. VAGAS: 8

PROFESSOR: João Alexandre R. G. Barbosa – joaobarbosa@unb.br

HORÁRIO: 14:00 – 17:40, segunda-feira

LOCAL: laboratório de Bioinformática 2 do IB

PRÉ-REQUISITO: 121045 - Biofísica

EMENTA

Conceitos sobre estrutura, função e evolução de proteínas. Uso e aprendizado de programas gratuitos disponíveis na WWW para alinhamento de sequências, modelagem molecular por homologia e *ab initio*, docking, dinâmica molecular e análise de estruturas.

PROGRAMA

Revisão e ampliação de conceitos sobre a estrutura, função e evolução de proteínas. Uso de ferramentas computacionais em práticas de bioinformática. Alinhamentos de sequências e baseados em estruturas, árvores filogenéticas. Sobreposição de estruturas. Foco em modelagem molecular por homologia e *ab initio*. Introdução ao *docking* e dinâmica molecular. Análise computacional das estruturas moleculares.

AVALIAÇÃO

A menção final será baseada em notas obtidas em seminários, exercícios e provas.

BIBLIOGRAFIA

Básica

* Molecular Modeling. Hans-Dieter Höltje, Wolfgang Sippl, Didier Rognan, Gerd Folkers. Wiley-VCH; 3 edition (2008).
* Lehninger Principles of Biochemistry. David L. Nelson & Michael M. Cox. W.H. Freeman; 6th edition (2012).
* Introduction to Protein Structure. Carl Branden, John Tooze. Garland Science; 2nd edition (1999).
* Artigos dos programas utilizados.

Complementar

* Capítulo Introdutório (Bioinformatics: Tools and Applications). Sitao Wu & Yang Zhang; 1st edition (2009).
* Molecular Modeling of Proteins (Part III). Andreas Kukol; 2nd edition (2015)
* Introduction to Protein Structure Prediction. Huzefa Rangwala & George Karypis; Wiley Series in Bioinformatics; 1st edition (2010)
* Comparative Genomics. Nicholas H. Bergman (eds.); Methods in Molecular Biology, volume 1 (2007)
* Computational Methods for Protein Structure Prediction and Modeling, Volume 1 Basic Characterization. Ying Xu, Dong Xu, Jie Liang; 1st edition (2007)
* Computational Methods for Protein Structure Prediction and Modeling, Volume 2 Structure Prediction. Ying Xu, Dong Xu, Jie Liang; 1st edition (2007)