

Centro de Ciências Biológicas
Departamento de Bioquímica
Programa de Pós-Graduação em Bioquímica (PBQ)

Curso:	PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM BIOQUÍMICA	
Departamento:	Bioquímica - DBQ	
Centro:	Ciências Biológicas - CCB	
COMPONENTE CURRICULAR		
Nome da Disciplina: Bioinformática aplicada ao estudo da interação proteína-ligante		Código: DBQ4137
Carga Horária Teórica: 15h	Carga Horária Prática: 30	Carga horária total: 45h
Nº de créditos teóricos: 1	Nº de créditos práticos: 1	Nº total de créditos: 2
Nível: Mestrado e doutorado		
Ano de Implantação: 2025		
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 pequenas moléculas.		
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		
Conteúdo teórico:		
• Introdução aos métodos de simulações computacionais; • Interações moleculares; • Estrutura tridimensional de proteínas;		
Conteúdo prático:		
• Modelagem de moléculas e biomacromoléculas; • Preparo de bibliotecas virtuais com pequenas moléculas e filtragem de dados; • Simulações de ancoragem molecular (<i>Docking</i> molecular); • Validação de protocolos de <i>Docking</i> molecular (método de <i>Redocking</i>); • Simulações para minimização de energia; • Renderização de figuras proteína-ligante para publicação;		
4. REFERÊNCIAS		
• VERLI, H. (Org.). Bioinformática da Biologia à Flexibilidade Molecular. 1ª edição: SBBq, 2014. (http://www.ufrgs.br/bioinfo/ebook/) • KESSEL, A.; BEN-TAL, N. Introduction to Proteins Structure, Function, and		

Motion. 2nd edition: CRC Press, 2018.

- GU, J.; BOURNE P. E. Structural Bioinformatics. 2nd edition. Wiley-Blackwell, 2009.
- Outras referências: Artigos científicos e tutoriais serão indicados durante a disciplina.

5. CRITÉRIOS DE AVALIAÇÃO:

Avaliação 1: os alunos serão avaliados durante as aulas práticas;

Avaliação 2: elaboração de um relatório contendo as atividades desenvolvidas em aula para proteínas alvos especificadas.

6. PROFESSOR(ES) RESPONSÁVEIS

Prof. Paulo Sérgio Alves Bueno

APROVAÇÃO DO CONSELHO ACADÊMICO