

DISCIPLINA: Modelagem Comparativa 3D de Biomacromoléculas

CÓDIGO: NUP492

UNIDADE: NUPEM/CCS

Nº DE CRÉDITOS: 3.0

CARGA HORÁRIA: 45h (Teórica: 45h)

PRÉ-REQUISITOS: **NUP123 (P)**

EMENTA: Modelagem comparativa de Biomacromoléculas. Correlações Estrutura-Função: Aplicações em Biologia Estrutural. Modelos empíricos de campos de força (Mecânica Molecular). Métodos de minimização de energia (Têmpera Simulada e Gradientes conjugados). Dinâmica molecular de proteínas. Introdução à utilização do Software GROMACS para minimização de energia e simulações de dinâmica molecular de macromoléculas.

OBJETIVOS: Auxiliar o aluno a compreender a importância da estrutura de biomacromoléculas para a função das mesmas e capacitá-lo a construir modelos teóricos tridimensionais utilizando ferramentas computacionais.

PROGRAMA:

- Introdução à química de proteínas
- Estrutura e Função de Biomacromoléculas
- Importância das interações intramoleculares para a estrutura de macromoléculas
- Modelagem Comparativa 3D de biomacromoléculas
- Ferramentas Computacionais úteis em Biologia Estrutural.

BIBLIOGRAFIA BÁSICA:

1. BRANDEN, C. & TOOZE, J. 1991. Introduction to Protein Structure. Ed. Garland. New York.
2. LEACH, A. 2001 Molecular Modeling: Principles and Applications. 2ºed. Ed. Longman. Singapore.
3. LEHNINGER, A.L.; NELSON, D.L. & COX, M.M. 2005. Princípios de bioquímica. 4ºed. Ed. Sarvier. São Paulo.
4. LESK, A.M. 2007. Introdução à Bioinformática, Ed. Artmed. Porto Alegre.

BIBLIOGRAFIA COMPLEMENTAR:

1. ALBERTS, B.; JOHNSON, A. & WALTER, P. 2010. Biologia Molecular da Célula. 5º ed. Ed. Artmed. Porto Alegre.
5. LEWIN, B. 2009. GENES IX. 9º ed. Ed. Artmed. Porto Alegre.