



Plano de Atividades Domiciliares ADE

Unidade Curricular: Modelagem Molecular

Professor(es):

Martin Wurtele

Contato:

martin.wurtele@unifesp.br

Ano Letivo: 2021

Semestre: 1º

Carga horária total: 72h

Turmas: I

Plataforma de acesso ao curso: Moodle.

Objetivos

Gerais:

Introdução à teoria e prática da modelagem molecular.

Específicos:

Curso teórico-prático de introdução aos principais conceitos da modelagem molecular desde a análise de campos de forças moleculares aos principais métodos de otimização de estruturas biológicas.

Conteúdo Programático e Cronograma

Semana	Conteúdo	Práticas pedagógicas	Carga horária
1	Métodos de bioinformática estrutural: introdução.	Estudo dirigido	4
2	Métodos de bioinformática estrutural: instalação de Linux	Estudo dirigido	4
3	Métodos de bioinformática estrutural: uso do shell	Estudo dirigido	4
4	Métodos de bioinformática estrutural: python	Estudo dirigido	4
5	Métodos de bioinformática estrutural: python	Estudo dirigido	4



6	Formatos de Arquivos	Estudo dirigido	4
7	Métodos de bioinformática estrutural: Instalação de software	Estudo dirigido	4
8	Métodos de bioinformática estrutural: Instalação de software	Estudo dirigido	4
9	Modelagem molecular: Modelagem por homologia	Estudo dirigido	4
10	Modelagem molecular: Docking	Estudo dirigido	4
11	Mecânica Molecular.	Estudo dirigido	4
12	Dinâmica molecular.	Estudo dirigido	4
13	Análise de trajetórias	Estudo dirigido	4
14	Cálculos energéticos.	Estudo dirigido	4
15 a 18	projeto de desenho de inibidores por modelagem molecular	Projeto	16

Metodologia de Ensino Utilizada:

Realização de estudos dirigidos baseados nos temas da apostila do curso. Entrega de projeto de pesquisa baseado na metodologia tratada na UC. Todos trabalhos serão disponibilizados com antecedência de pelo menos uma semana antes de uma data de entrega definida. Plantão de dúvidas ao vivo por google meet em horários das aulas.

Metodologia de Avaliação:

Avaliação de estudos dirigidos entregues: 60%
Avaliação de projeto entregue: 40%

Bibliografia Básica:

1. LEACH, A.R. Molecular Modelling, Principles and Applications. 2nd Ed. Prentice Hall 2001.
2. SCHLICK, T. Molecular Modeling and Simulation. Springer 2002.
3. CRAMER, C.J. Computational Chemistry. Wiley 2002.

Bibliografia Complementar:

1. TINOCO, Ignacio; SAUER, Kenneth; WANG, James C.; PUGLISI, Joseph D. Physical chemistry: principles and applications in biological sciences. 4 ed. Upper Saddle, NJ: Prentice Hall, 2003.
2. BRANDEN, C.; TOOZE, J. Introduction to Protein Structure, 2nd Ed., Garland, 1999.
3. MILLER, TANNER. Essentials of Chemical Biology. Structure and Dynamics of Biological Macromolecules. Wiley 2013.



Ministério da Educação
Universidade Federal de São Paulo
Instituto de Ciência e Tecnologia



4. KINSER, Jason. Python for bioinformatics. Sudbury, Massachusetts: Jones and Bartlett Publishers, 2009.
5. MCQUARRIE, Donald A. Quantum chemistry. 2 ed. Sausalito, California: University Science Books, 2007.