

Programa Analítico de Disciplina

BQI 762 - Bioinformática Estrutural

Departamento de Bioquímica e Biologia Molecular - Centro de Ciências Biológicas e da Saúde

Catálogo: 2024

Número de créditos: 4

Carga horária semestral: 60h

Carga horária semanal teórica: 4h

Carga horária semanal prática: 0h

Semestres: I

Ementa

Estrutura de biomoléculas
Bancos de dados estruturais
Visualização de estruturas biomoleculares
Modelagem molecular
Docking proteína-ligante
Simulações de dinâmica molecular
Evolução tridimensional
Bioinformática estrutural na biotecnologia

Conteúdo

Unidade	T	P	To
1. Estrutura de biomoléculas 1. Estrutura de proteínas 2. Estrutura de complexos proteína-ácidos nucleicos 3. Estrutura de complexos proteína ligante	6h	0h	6h
2. Bancos de dados estruturais 1. Introdução aos bancos de dados estruturais 2. Banco de dados de proteínas e ligantes 3. Bancos de dados de enzimas 4. Uso e interpretação de bancos de dados estruturais	8h	0h	8h
3. Visualização de estruturas biomoleculares 1. Introdução à comandos básicos de bioinformática para visualização biomolecular 2. Ferramentas para visualização: Pymol, UCSF Chimera, VMD 3. Interpretação e manipulação de estruturas biomoleculares	8h	0h	8h
4. Modelagem molecular 1. Métodos de modelagem molecular de proteínas 2. AlphaFold2 e o estado da arte em modelagem de proteínas 3. Modelagem de complexos oligoméricos 4. Controle de qualidade de modelos estruturais	8h	0h	8h
5. Docking proteína-ligante 1. Algoritmos e softwares de docking proteína-ligante	8h	0h	8h

A autenticidade deste documento pode ser conferida no site <https://siadoc.ufv.br/validar-documento> com o código: WJUK.8AFA.JNHG

2. Predição de afinidade proteína-ligante			
6. Simulações de dinâmica molecular 1. Introdução às simulações de dinâmica molecular 2. Criação de sistemas para proteínas solúveis 3. Criação de sistemas membranares 4. Produção e análise de trajetórias dinâmicas	10h	0h	10h
7. Evolução tridimensional 1. Análise de similaridade estrutural de proteínas 2. Análise filogenética baseada em estrutura tridimensional	6h	0h	6h
8. Bioinformática estrutural na biotecnologia 1. Aplicações da biologia estrutural no descobrimento de proteínas 2. Uso da bioinformática estrutural na engenharia genética e áreas correlatas	6h	0h	6h
Total	60h	0h	60h

Teórica (T); Prática (P); Total (To);

BQI 762 - Bioinformática Estrutural

Bibliografias básicas

Descrição	Exemplares
DAVID L. NELSON, MICHAEL M. COX. Lehninger Principles of Biochemistry. Macmillan Learning. 7Th ed. 1091p. 2021.	0
ANTÃO, Tiago. Bioinformatics with Python Cookbook - Second Edition. Packt Publishing. 2nd ed. 390p. 2019.	0
HAUBOLD, Bernhard; BÖRSCH-HAUBOLD, Angelika. Bioinformatics for Evolutionary Biologists: A Problems Approach. Springer. 2nd ed. 411p. 2023.	0
COMPEAU, Phillip; PEVZNER, Pavel. Bioinformatics Algorithms: An Active Learning Approach. 3rd ed. Active Learning Publishers. 908p. 2020.	0
ANDERSEN, Hans C. Understanding Molecular Simulation: From Algorithms to Applications. Academic Press, 2nd ed. 2020.	0

Bibliografias complementares

Não definidas

Syllabus

BQI 762 - Structural Bioinformatics

Departamento de Bioquímica e Biologia Molecular - Centro de Ciências Biológicas e da Saúde

Catalog: 2024

Number of credits: 4
Total hours: 60h
Weekly workload - Theoretical: 4h
Weekly workload - Practical: 0h

Period: I

Content

Structure of biomolecules
Structural databases
Visualization of biomolecular structures
Molecular modeling
Protein-ligand docking
Molecular dynamics simulations
Three-dimensional evolution
Structural bioinformatics in biotechnology

Course program

Unit	T	P	To
1. Structure of biomolecules 1. Protein structure 2. Protein-nucleic acid complex structure 3. Protein-ligand complex structure	6h	0h	6h
2. Structural databases 1. Introduction to structural databases 2. Protein and ligand databases 3. Enzyme databases 4. Use and interpretation of structural databases	8h	0h	8h
3. Visualization of biomolecular structures 1. Introduction to basic bioinformatics commands for biomolecular visualization 2. Visualization Tools: PyMOL, UCSF Chimera, VMD 3. Interpretation and manipulation of biomolecular structures	8h	0h	8h
4. Molecular modeling 1. Methods of protein molecular modeling 2. AlphaFold2 and the state of the art in protein modeling 3. Oligomeric complex modeling 4. Quality control of structural models	8h	0h	8h
5. Protein-ligand docking 1. Protein-ligand docking algorithms and software; 2. Protein-ligand affinity prediction	8h	0h	8h

A autenticidade deste documento pode ser conferida no site <https://siadoc.ufv.br/validar-documento> com o código: WJUK.8AFA.JNHG

6. Molecular dynamics simulations 1. Introduction to molecular dynamics simulations 2. Creation of systems for soluble proteins 3. Creation of membrane systems 4. Production and analysis of dynamic trajectories	10h	0h	10h
7. Three-dimensional evolution 1. Analysis of protein structural similarity 2. Phylogenetic analysis based on three-dimensional structure	6h	0h	6h
8. Structural bioinformatics in biotechnology 1. Applications of structural biology in protein discovery 2. Use of structural bioinformatics in genetic engineering and related areas	6h	0h	6h
Total	60h	0h	60h

Theoretical (T); Practical (P); Total (To);

BQI 762 - Structural Bioinformatics

Fundamental references

Description	Copies
DAVID L. NELSON, MICHAEL M. COX. Lehninger Principles of Biochemistry. Macmillan Learning. 7Th ed. 1091p. 2021.	0
ANTÃO, Tiago. Bioinformatics with Python Cookbook - Second Edition. Packt Publishing. 2nd ed. 390p. 2019.	0
HAUBOLD, Bernhard; BÖRSCH-HAUBOLD, Angelika. Bioinformatics for Evolutionary Biologists: A Problems Approach. Springer. 2nd ed. 411p. 2023.	0
COMPEAU, Phillip; PEVZNER, Pavel. Bioinformatics Algorithms: An Active Learning Approach. 3rd ed. Active Learning Publishers. 908p. 2020.	0
ANDERSEN, Hans C. Understanding Molecular Simulation: From Algorithms to Applications. Academic Press, 2nd ed. 2020.	0

Complementary references

Not defined