MINISTÉRIO DA EDUCAÇÃO
UNIVERSIDADE FEDERAL DE GOIÁS
INSTITUTO DE CIÊNCIAS BIOLÓGICAS
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM GENÉTICA E BIOLOGIA MOLECULAR

DISCIPLINA: Dinâmica Molecular de Proteínas
COORDENADORES: Profa. Dra. Maristela Pereira e Dra. Luciane Sussuchi da Silv
DOCENTES: Profa. Dra. Maristela Pereira e Dra. Luciane Sussuchi da Silva
CARGA HORÁRIA POR DOCENTE: 32h
Nº DE CRÉDITOS: 4 (CH teórica: 32h e CH prática: 32h)

EMENTA

Esta disciplina visa a introdução teórica e prática de métodos de dinâmica molecular aplicados à simulação computacional de proteínas. Serão apresentados conceitos teóricos de campo de força, métodos de integração e ensembles termodinâmicos, bem como as limitações do método e comparação com dados experimentais. As aulas práticas incluirão comandos básicos de Linux para utilização do pacote de dinâmica molecular, análise e processamento de arquivos PDB, cálculo de pka de resíduos tituláveis, softwares de visualização de proteínas, protocolos de submissão e análise de dinâmica molecular utilizando o pacote GROMACS. Diferentes abordagens de dinâmica molecular e como dinâmica a pH constante, métodos de intensificação de amostragem e métodos híbridos QMMM também serão brevemente discutidos com foco em suas aplicações.

OBJETIVOS

OBJETIVO GERAL: Apresentar e discutir as aplicações de dinâmica molecular no estudo de proteínas. As aulas práticas permitirão que os alunos sejam familiarizados com todo o processo de execução de uma dinâmica molecular clássica assim como a interpretação dos dados obtidos.

Objetivo específico 1: Apresentar os conceitos teóricos básicos de dinâmica molecular clássica.

Objetivo específico 2: Conhecer as vantagens e limitações dos métodos de dinâmica molecular aplicados ao estudo de proteínas.

Objetivo específico 3: Treinamento prático dos processos de submissão e análise de dinâmica molecular.

Objetivo específico 4: Orientar os alunos quanto à análise e interpretação de dados obtidos.

CONTEÚDO PROGRAMÁTICO

Conteúdo Programático – Aulas Teóricas

1) Estrutura e função de proteínas:
   - Modelos tridimensionais
   - Enovelamento
   - Métodos para obtenção de estrutura
   - Sistemas de coordenadas
2) Introdução a dinâmica molecular:
   - Conceitos básicos e aplicações
   - Campo de força
   - Métodos de integração
   - Ensembles termodinâmicos
   - Escalas de tempo em dinâmica molecular
   - Limitações atuais
3) Diferentes abordagens e aplicações
   - Dinâmica a pH constante
   - Métodos de intensificação de amostragem
   - Métodos híbridos QMMM

Conteúdo Programático – Aulas Práticas

1) Introdução a sistemas Linux:
   - Comandos básicos para utilização de pacotes de dinâmica molecular
2) Análise e processamento de arquivos PDB:
   - Estrutura do arquivo
   - Principais análises e edições necessárias
   - Cálculo de pka de resíduos tituláveis
   - Programas de visualização (Pymol, VMD, Chimera dentre outros)
3) Dinâmica Molecular
   - Arquivos de topologia, coordenadas e mdp
   - Protocolo para execução de dinâmica molecular
   - Protocolo para submissão em cluster multiusuário

REFERÊNCIAS

1. VERLI H. Bioinformática da Biologia à Flexibilidade Molecular. Vol. 53, Universidade Federal do Rio Grande do Sul. 2014.
2. Leach AR. Molecular modelling : principles and applications. Prentice Hall; 2001.
3. Introdução a Linux: http://www.guiafoca.org/