

PLANO DE ENSINO

I. IDENTIFICAÇÃO

Programa: Pós-Graduação em Ciências Aplicadas à Saúde

Disciplina: Modelagem de Sistemas Biomoleculares

Código da disciplina: CAS0095

Carga horária: 64 horas

Professores: Roosevelt Alves da Silva

II. EMENTA

Fundamentos da predição da estrutura e função de proteínas; Programas de visualização e análises de sistemas biomoleculares. Métodos: Modelagem comparativa; Mecânica molecular para macromoléculas; Campo de forças molecular; Algoritmos de minimização de estruturas; Dinâmica Molecular; Método Monte Carlo; Docking Molecular.

III. OBJETIVOS

Objetivo Geral

Capacitar o estudante a compreender os fundamentos teóricos e computacionais da modelagem de sistemas biomoleculares, bem como a aplicar métodos de modelagem estrutural e simulação molecular na análise da estrutura, dinâmica e interação de macromoléculas biológicas, com foco em proteínas e seus complexos.

Objetivos Específicos

- Compreender os princípios estruturais das proteínas, incluindo níveis de organização estrutural e relações entre estrutura e função.
- Apresentar os fundamentos teóricos da modelagem molecular, incluindo mecânica molecular, campos de força e representação computacional de macromoléculas.
- Capacitar os estudantes no uso de ferramentas computacionais de visualização e análise estrutural, aplicadas a sistemas biomoleculares.
- Introduzir os principais métodos de predição estrutural, com ênfase em modelagem comparativa (homology modeling).
- Compreender os fundamentos matemáticos e físicos da minimização de energia, utilizados na otimização estrutural de macromoléculas.
- Apresentar os princípios e aplicações da Dinâmica Molecular, incluindo integração das equações de movimento e análise de trajetórias.
- Introduzir métodos estocásticos de amostragem conformacional, como o método de Monte Carlo.
- Explorar os fundamentos do docking molecular, com foco na predição de interações proteína-ligante.
- Desenvolver capacidade crítica na interpretação de resultados computacionais, avaliando limitações e

confiabilidade dos modelos gerados.

- Estimular a aplicação da modelagem biomolecular em problemas de biologia estrutural, biofísica e descoberta de fármacos.

IV. CONTEÚDO E CRONOGRAMA

Encontro 1: 17/03/2026 – Terça-feira – horário: 07:30 – 11:10 h

Apresentação da disciplina. Introdução à modelagem de sistemas biomoleculares. Estrutura de proteínas: níveis estruturais, organização tridimensional e relação estrutura-função.

Encontro 2: 24/03/2026 – Terça-feira – horário: 07:30 – 11:10 h

Bancos de dados estruturais (PDB, UniProt). Formato de arquivos estruturais. Introdução a programas de visualização molecular (PyMOL, VMD ou Chimera).

Encontro 3: 31/03/2026 – Terça-feira – horário: 07:30 – 11:10 h

Análise estrutural de proteínas: elementos de estrutura secundária, interações moleculares, identificação de sítios ativos e cavidades.

Encontro 4: 14/04/2026 – Terça-feira – horário: 07:30 – 11:10 h

Fundamentos da predição de estrutura de proteínas. Alinhamento de sequências e identificação de proteínas homólogas.

Encontro 5: 28/04/2026 – Terça-feira – horário: 07:30 – 11:10 h

Modelagem comparativa (Homology Modeling): princípios, seleção de template, construção de modelos estruturais.

Encontro 6: 05/05/2026 – Terça-feira – horário: 07:30 – 11:10 h

Avaliação e validação de modelos estruturais: Ramachandran, qualidade estrutural, verificação estereoquímica.

Encontro 7: 12/05/2026 – Terça-feira – horário: 07:30 – 11:10 h

Fundamentos de mecânica molecular aplicada a macromoléculas. Energia potencial molecular e componentes das funções de energia.

Encontro 8: 19/05/2026 – Terça-feira – horário: 07:30 – 11:10 h

Campos de força moleculares (AMBER, CHARMM, OPLS): parametrização e aplicações em biomoléculas.

Encontro 9: 26/05/2026 – Terça-feira – horário: 07:30 – 11:10 h

Algoritmos de minimização de energia: métodos de steepest descent e conjugate gradient aplicados à otimização estrutural.

Encontro 10: 02/06/2026 – Terça-feira – horário: 07:30 – 11:10 h

Fundamentos da Dinâmica Molecular: equações de movimento, integração numérica e condições de simulação.

Encontro 11: 09/06/2026 – Terça-feira – horário: 07:30 – 11:10 h

Preparação de sistemas biomoleculares para simulação de dinâmica molecular: solvatação, íons e condições de contorno.

Encontro 12: 16/06/2026 – Terça-feira – horário: 07:30 – 11:10 h

Análise de trajetórias de dinâmica molecular: RMSD, RMSF, raio de giro, análise estrutural e estabilidade conformacional.

Encontro 13: 23/06/2026 – Terça-feira – horário: 07:30 – 11:10 h

Métodos de amostragem conformacional: fundamentos do método de Monte Carlo aplicado a biomoléculas.

Encontro 14: 30/06/2026 – Terça-feira – horário: 07:30 – 11:10 h

Fundamentos do docking molecular: princípios, funções de pontuação e estratégias de busca conformacional.

Encontro 15: 07/07/2026 – Terça-feira – horário: 07:30 – 11:10 h

Aplicações de docking molecular em interação proteína-ligante e descoberta de fármacos. Interpretação dos resultados. Entrega das listas de exercícios.

Encontro 16: 14/07/2026 – Terça-feira – horário: 07:30 – 11:10 h

Apresentação e discussão de trabalhos/projetos dos estudantes utilizando ferramentas de modelagem biomolecular. Revisão geral da disciplina.

V. METODOLOGIA

Aulas Teóricas: O professor utilizará aulas expositivas intercaladas com conteúdos retirados de livros, artigos científicos e materiais didáticos da área de modelagem molecular, bioinformática estrutural e biofísica computacional.

Aulas práticas: O professor fornecerá de forma escrita a descrição de cada atividade a ser desenvolvida pelos alunos em seus computadores e acompanhará a realização por meio dos arquivos compartilhados em uma pasta do Dropbox. Diferentes ferramentas computacionais de modelagem biomolecular serão utilizadas no laboratório juntamente com o professor, incluindo programas de visualização molecular, análise estrutural e simulação de sistemas biomoleculares. Os alunos acompanharão as etapas de preparação, execução e análise dos cálculos computacionais, testando os procedimentos em seus próprios computadores. Algumas ferramentas de modelagem molecular serão aprendidas através de exemplos práticos envolvendo análise estrutural de proteínas, modelagem comparativa, simulações de dinâmica molecular e docking molecular. Para acompanhar as atividades previstas é necessário ter acesso regular à internet.

VI. CRITÉRIOS DE AVALIAÇÃO

A avaliação do aprendizado será realizada através de listas de exercícios e apresentação de um trabalho prático envolvendo a aplicação de métodos de modelagem molecular em sistemas biomoleculares. A nota bimestral

será composta pela média ponderada entre as notas de:

AVA1: média das Listas de Exercícios envolvendo análise estrutural de biomoléculas e aplicação de ferramentas computacionais de modelagem molecular.

AVA2: Apresentação de um projeto envolvendo a aplicação de métodos computacionais para modelagem de sistemas biomoleculares, podendo incluir modelagem comparativa de proteínas, análises estruturais, simulações de dinâmica molecular ou docking molecular.

A média final será calculada pela média das duas notas AVA1 e AVA2, sendo cada uma calculada da seguinte forma:

$$\text{Média Final} = (\text{AVA1} + \text{AVA2})/2$$

Estará aprovado o estudante que obtiver média maior ou igual a 6,0 e uma frequência mínima exigida de 75%. Será considerado aprovado o discente que obtiver conceito APTO (conceito A, B ou C), de acordo com o Regulamento do PPG. A relação entre conceito e nota, nesta disciplina, é expressa da seguinte forma:

Conceito	Significado	Notas
A	Muito Bom, aprovado, com direito ao crédito.	10,0 – 9,0
B	Bom, aprovado, com direito ao crédito.	7,5 – 8,9
C	Regular, aprovado, com direito ao crédito.	6,0 – 7,4
D	Insuficiente, reprovado, sem direito ao crédito.	≤ 5,9

VII. Bibliografia:

Básica:

1. Leach, A. R. Molecular modelling: principles and applications. Harlow, England; New York: Prentice Hall. 2001. xxiv, 744 p., [16] p. of plates p.
2. Schleyer, P. V. R. Encyclopedia of computational chemistry. Chichester: New York: J. Wiley. 1998. 5 v. (xxix, 3429 p.) p.
3. Schlick, T. Molecular modeling and simulation: an interdisciplinary guide. New York: Springer. 2002. xliii, 634 p. p. (Interdisciplinary applied mathematics; v. 21)
4. Young, D. C. Computational Chemistry. A Practical guide for applying techniques to real-world problems. New York. Wiley. 2001. 365p.
5. Computer Simulation of Liquids. M. P. Allen, D. J. Tildesley. Oxford Science Publications. 1987.

Complementar:

1. Hugo Verli (2014). Bioinformática da Biologia à flexibilidade molecular. Porto Alegre, 282 p. : il. Disponível em: <https://lume.ufrgs.br/handle/10183/166105>.
2. Tao Jiang, Ying Xu, Michael Zhang (2002). Current Topics in Computational Molecular Biology.

Tsinghua University Press / MIT Press.

3. Andreas D. Baxevanis e B. F. Francis Ouellette (2005). A Practical Guide to the Analysis of Genes and Proteins. Wiley-Interscience, 3rd edition.

4. Buljan, M., Banaei-Esfahani, A., Blattmann, P. *et al.* A computational framework for the inference of protein complex remodeling from whole-proteome measurements. *Nat Methods* 20, 1523–1529 (2023). <https://doi.org/10.1038/s41592-023-02011-w>

5. Tutoriais dos programas de bioinformática do NCBios-UFJ

Data

Jataí, 09 de março de 2026.

Prof. Dr. Roosevelt Alves da Silva