



UNIVERSIDADE FEDERAL RURAL DO RIO DE JANEIRO
PRÓ-REITORIA DE PESQUISA E PÓS-GRADUAÇÃO
SECRETARIA ACADÊMICA DE PÓS-GRADUAÇÃO (SAPG)

PROGRAMA ANALÍTICO

DISCIPLINA

Código: I ____ -1 _____	Nome: Simulação Computacional de Macromoléculas Biológicas
Créditos: 3	Carga Horária: 45

DEPARTAMENTO DE:

INSTITUTO DE: ICE

PROFESSOR(ES): Nome completo sem abreviações e matrícula SIAPE (UFRRJ) ou se de instituição de pesquisa o CPF. Endereço eletrônico para contato.

OBJETIVOS: Apresentar objetivo geral e/ou específico da disciplina. Este item pode ser exigido em alguns Programas de pós-graduação de forma mais extensa.

EMENTA: Estrutura de proteínas. Classificação estrutural de proteínas. Banco de

dados de estruturas de proteínas (PDB - "Protein Data Bank"). Visualização molecular. Interações físicas entre átomos e moléculas. Campos de força clássicos. Otimização de geometria molecular; Introdução à modelagem comparativa de estruturas de proteínas; Introdução à técnica de dinâmica molecular e métodos de docking receptor-ligante.

CONTEÚDO PROGRAMÁTICO:

1. Discriminar os temas apresentados na ementa na forma de itens e subitens.
2. O conteúdo programático pode e deve ser atualizado com frequência pelos professores, mantendo a obrigatoriedade de abordar os temas apresentados na ementa.
3. O programa deve ser adequado ao número de créditos da mesma e pode envolver atividades extraclasses com supervisão do professor responsável ou colaboradores eventuais, que são consideradas na carga horária adicional de 30 a 45 horas-aula por crédito prático.

METODOLOGIA:Item exigido em alguns Programas de Pós-graduação.

BIBLIOGRAFIA: (usar normas ABNT para as citações)

BÁSICA:

- A. R. Leach - Molecular Modelling: Principles and Applications. Pearson-Prentice Hall Creighton, T.E., 2001
- C. Branden & J. Tooze - Introduction to Protein Structure, Garland Inc, NY e London, 1999.
- D. Voet, e J. G. Voet - Biochemistry, John Wiley & Sons, 1995.

COMPLEMENTAR:Outras publicações disponíveis através do docente ou em bibliotecas que o aluno tenha acesso livre.

PERÍODICOS CIENTÍFICOS E OUTROS:O conteúdo do programa deve ser respaldado por bibliografia adequada e atual, que inclua periódicos e textos científicos de revisão relevantes na subárea de conhecimento da disciplina.