

Cronograma de Biofísica

Prof. Dr. Walter F. de Azevedo Jr.

Site: azevedoloab.net

Aulas Teórico-Práticas

AGOSTO

06	Aula inaugural (Sala 202-Bloco C-Prédio 12)
13	Visualização Computacional de Proteínas (Sala 202-Bloco C-Prédio 12)
20	Simulação Computacional da Interação de Fármacos com Proteínas I (Sala 202-Bloco C-Prédio 12)
27	Simulação Computacional da Interação de Fármacos com Proteínas II (Sala 202-Bloco C-Prédio 12)

SETEMBRO

03	Transporte passivo (Sala 202-Bloco C-Prédio 12)
10	Transporte ativo (Sala 202-Bloco C-Prédio 12)
17	Potencial de repouso (Sala 202-Bloco C-Prédio 12)
24	Potencial de ação (Sala 202-Bloco C-Prédio 12)

OUTUBRO

01	Transmissão sináptica (Sala 202-Bloco C-Prédio 12)
08	Desenvolvimento do projeto de pesquisa (Sala 202-Bloco C-Prédio 12)
22	Trabalho 1 (Sala 202-Bloco C-Prédio 12)
29	Contração muscular (Sala 202-Bloco C-Prédio 12)

NOVEMBRO

05	Espectrofotometria (Sala 219-Bloco C-Prédio 12)
12	Desenvolvimento do projeto de pesquisa (Sala 202-Bloco C-Prédio 12)
19	Radiações (Sala 202-Bloco C-Prédio 12)
26	Fotometria de Chama (Sala 219-Bloco C-Prédio 12)

DEZEMBRO

03	Trabalho 2 e entrega do artigo referente ao projeto de pesquisa (Sala 202-Bloco C-Prédio 12)
10	G2 na Sala 202-Bloco C-Prédio 12

As recuperações de trabalhos serão realizadas somente para aqueles que estiverem **COMPROVADAMENTE** em ausência autorizada, conforme legislação vigente.

Critério de Avaliação

A média final é calculada pela seguinte fórmula.

$$G1 = \frac{(6P + 4T)}{10}$$

Onde P é a nota do projeto e T a média aritmética dos trabalhos.

Bibliografia

OLIVEIRA, Jarbas Rodrigues de; WACHTER, Paulo Harald; AZAMBUJA, Alan Arrieira. **Biofísica para ciências biomédicas**. Porto Alegre: EDIPUCRS, 2002. 313 p.

CONSTANZO, L. **Fisiologia**. 4. ed. Rio de Janeiro : Guanabara Koogan, 2008. 321 p.

GUYTON, A.C. **Tratado de Fisiologia Médica**. 11. ed. Rio de Janeiro: Elsevier, 2006. 1115 p. : il.

Modelo de Artigo

Título: Simulação computacional da interação do colocar nome da molécula inibidora com a quinase dependente de ciclina 2

Autores: Até dois alunos

Filiação: Pontifícia Universidade Católica do Rio Grande do Sul – PUCRS. Av. Ipiranga, 6681. Porto Alegre-RS, Brasil. 90619-900

Resumo (mínimo de 100 palavras e máximo de 200 palavras)

No resumo deve ser apresentado a ideia geral do artigo, e uma pequena descrição dos resultados. Uma forma de pensar o resumo do artigo é que alguém que lesse o resumo ficasse interessado em ler o artigo completo, assim, deve ser atrativo.

Introdução (mínimo de 350 palavras)

Na introdução faça uma descrição do sistema biológico, no caso a quinase dependente de ciclina 2. Destaque o papel biológico da proteína, seu envolvimento no controle da progressão do ciclo celular e o porquê sua inibição tem potencial farmacológico. Fazer uma descrição com suas palavras do que vem a ser a simulação de docking molecular e seu potencial uso na descoberta de novos fármacos. Destaque que será usada uma abordagem computacional para o estudo de um ligante com a proteína. Incluir pelo menos uma figura, preferencialmente de sua autoria. As referências devem ser citadas no texto, por exemplo (Bitencourt-Ferreira & de Azevedo, 2018). Se a referência tiver mais de dois autores, use o sobrenome do primeiro autor seguido de *et al.* Usem o PubMed para pesquisar artigos sobre o assunto.

Métodos (mínimo de 150 palavras)

Nesta seção devem ser descritos os métodos computacionais usados no projeto. Incluir os artigos relacionados com os métodos. Por exemplo, incluir que as estruturas foram obtidas a partir da base de dados *Protein Data Bank* (PDB) (incluir artigo) e que o programa usado, foi o *Molegro Virtual Docker* (incluir referência ao artigo do programa). A ideia principal é que um pesquisador da área consiga reproduzir seus resultados. Assim, deve ser sucinto, mas fornecer detalhes suficientes para que um cientista consiga obter os mesmos resultados a serem relatados. Pode incluir figuras (na forma de fluxogramas).

Resultados e Discussão (mínimo de 300 palavras)

Nesta seção os autores descrevem seus principais resultados e já discutem em seguida. Tenham em mente o modelo chave-fechadura para a discussão dos resultados. Nesta seção devem ser incluídas as figuras feitas durante as aulas. Pelo menos uma com o resultado da validação do docking, onde deve ser reportado o valor de desvio médio quadrático (RMSD) e o valor da energia de ligação calculada pelo programa de docking. Destacar os aminoácidos que interagem com os ligantes, tanto o usado para testar o programa como o novo ligante. Dica: Inclusão de estudos comparativos com outros artigos serão considerados positivamente na avaliação.

Conclusão (mínimo de 100 palavras)

Esta seção deve ter um parágrafo e fechar o artigo, onde os autores devem destacar se o ligante analisado é promissor para uso farmacológico. Use o valor da energia calculado como um dos parâmetros, bem como os aminoácidos que interagem com o ligante.

Referências (no mínimo 5 artigos científicos seguindo o formato abaixo)

Bitencourt-Ferreira G, de Azevedo Jr. WF. Development of a machine-learning model to predict Gibbs free energy of binding for protein-ligand complexes. *Biophys Chem.* 2018; 240: 63–69.

Data da entrega na forma impressa somente: até 3 de dezembro de 2018