

## Cronograma de Biofísica Molecular

Prof. Dr. Walter F. de Azevedo Jr.

Site: azevedoloab.net

Semana	Aula	Resumo
1 (06/08)	Prática	Apresentação da Disciplina
2 (13/08)	Prática	Forças que estabilizam a estrutura tridimensional de macromoléculas biológicas
3 (20/08)	Prática	Estrutura tridimensional de proteínas
4 (27/08)	Prática	Estrutura tridimensional de ácidos nucleicos
5 (03/09)	Prática	Desenvolvimento do projeto de pesquisa
6 (10/09)	Prática	Desenvolvimento do projeto de pesquisa
7 (17/09)	Prática	Potencial de repouso e potencial de ação
8 (24/09)	Prática	Neurônios e transmissão sináptica
9 (01/10)	Prática	Desenvolvimento do projeto de pesquisa e Trabalho 1
10 (08/10)	Prática	Modelos atômicos e espectroscopia
11 (22/10)	Prática	Conceitos sobre radiação
12 (29/10)	Prática	Radioatividade
13 (05/11)	Prática	Técnicas biofísicas para o estudo de proteínas
14 (12/11)	Prática	Astrobiologia
16 (19/11)	Prática	Desenvolvimento do projeto de pesquisa e Trabalho 2
16 (26/11)	Prática	Desenvolvimento do projeto de pesquisa
17 (03/12)	Prática	Entrega do Artigo
<b>18 (10/12)</b>	<b>Prova G2</b>	<b>G2 (Toda Matéria)</b>

### 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.  
OKUNO, Emiko; CALDAS, Iberê Luiz; CHOW, Cecil. **Física para ciências biológicas e biomédicas**. São Paulo: Harper & Row do Brasil, 1982. 490 p.  
Champe, Pamela C.; HARVEY, Richard A.; FERRIER, Denise R. **Bioquímica ilustrada**. 3ª edição. Porto Alegre: Artmed, 2006. 533 p.

## 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**