



PLANO DE ENSINO

ANO LETIVO	QUADRIMESTRE	TURNO	CAMPUS
2024	Q1	Diurno	Santo André

CÓDIGO	NOME	TURMAS
BIS-202	Modelagem Molecular	TBIS20220241

PROFESSOR RESPONSÁVEL

Ana Lígia Barbour Scott

EMENTA

Conceitos Básicos de Modelagem Molecular, Campos de Força Empíricos para Mecânica Molecular, Minimização de Energia, Dinâmica Molecular, Monte Carlo, Análise Conformacional de Macromoléculas, Predição de Estruturas de Proteínas, Enovelamento de Proteínas, Modelos para DNA, Modelos para Polissacarídeos, QM/MM.

OBJETIVOS

Apresentar os fundamentos e técnicas básicas da área de modelagem molecular e simulação de macromoléculas bem como fundamentos de Biologia Estrutura e termodinâmica aplicada a sistemas biológicos.

BIBLIOGRAFIA RECOMENDADA

**Bibliografia Básica**

- VIANNA, J.D.M.; FAZZIO, A.; CANUTO, S. Teoria Quântica de Moléculas e Sólidos. Ed. Livraria da Física, São Paulo, 2004.
- MORGON, H.N.; COUTINHO, K. Métodos de Química teórica e Modelagem Molecular Ed. Livraria da Física, São Paulo, 2007.
- LEACH, A. Molecular Modeling: Principles and Application, 2 ed., Prentice Hall, 2001.
- RAPAPORT, D.C. The Art of Molecular Dynamics Simulation. Cambridge University Press, Cambridge, 1995.

**Bibliografia Complementar**

- MARTIN, R.M. Electronic Structure, Basic Theory and Practical Methods, Cambridge, 2004.
- ALLEN, MP; TILDESLEY, DJ. Computer Simulation of Liquids. Clarendon Press, Oxford, 1987.

## PLANEJAMENTO PRELIMINAR

*As aulas serão em laboratório (Bloco A – Santo André)*

Semana	Dias		Tópico
1	05/fevereiro	06/fevereiro	Apresentação da disciplina e Conceitos Básicos de Biologia Estrutural
2			Modularização e Estruturas de seleção (13/fev é feriado)
3	19/fevereiro	20/fevereiro	Conceitos Básicos de Termodinâmica Aplicado a Sistemas Biológicos e Envovelamento de Proteínas.
4	27/fevereiro	29/fevereiro	Leitura e Discussão de Artigos
5	05/março	07/março	Conceitos Básicos de Termodinâmica Aplicado a Sistemas Biológicos e Envovelamento de Proteínas.
6	12/março	14/março	Modelagem por Homologia, Predição de Estruturas Proteicas
7	19/março	21/março	Dinâmica Molecular
8	26/março	28/março	Dinâmica Molecular
9	02/abril	04/abril	Projeto
10	09/abril	11/abril	Desenvolvimento de Projeto
11	16/abril	18/abril	Desenvolvimento de Projeto, Apresentação de Projeto
12	23/abril	25/abril	<b>Seminários</b>
13	02/maio		Prova substitutiva (quinta-feira)

## AVALIAÇÃO

**Linguagem de programação:** Python

### **Avaliação:**

O conceito da disciplina será constituída pelas avaliações das **2 listas (L)** de exercícios usando a Plataforma Moodle, um Projeto em dupla e duas provas (P) em sala de aula (laboratório).

Média final (MF) antes da recuperação será  $MF = 0.5Seminário + 0.5 * Porjeto$ , em que:

Conceito final :

- A, se  $MF \geq 9,0$
- B, se  $7,5 \leq MF < 9,0$
- C, se  $6,0 \leq MF < 7,5$
- D, se  $5,0 \leq MF < 6,0$
- F, se  $MF < 5,0$
- O, se ausência total exceder 25%

### **Avaliação Substitutiva (SUB):**

Estarão habilitados para a avaliação substitutiva os alunos que se ausentarem a uma das provas do período regular e contemplados pelo benefício de acordo com a Resolução CONSEPE no. 227, de 23 de abril de 2018. Nesta hipótese, o aluno deverá entregar uma justificativa válida para o docente no dia da avaliação.

### **Avaliação de Recuperação (REC):**

A recuperação será aplicada apenas aos alunos que tiverem conceito final D ou F e cujas ausências não excederem 25% da quantidade de aulas. A avaliação consistirá em uma prova, em formato similar às aplicadas ao longo do curso. O conteúdo da prova englobará todos os temas vistos durante o quadrimestre. A nota obtida na prova de recuperação (NR) será usada obter a nota final com recuperação (NFR), que

consiste na média:  $NFR = \max \{MF, (MF + NR) / 2\}$

O conceito final obtido na recuperação substituirá o conceito original e será:

- C, se  $NFR \geq 6,0$
- D, se  $5,0 \leq NFR < 6,0$
- F, se  $0,0 \leq NFR < 5,0$
- A P

A Prec será agendada em sala/horário para a segunda semana do quadrimestre 2.

**Frequência:**

A presença nas aulas será controlada por lista de presença. A reprovação por faltas (conceito O) ocorre caso a frequência seja inferior a 75% (resolução CONSEPE nº 139).

**ATENDIMENTO AO ALUNO**

Presencial: segunda-feira, das 13h-15h na sala 102, bloco A.