

Bioquímica Computacional

Ocorrência: 5º semestre

Carga horária: T 22.5h; PL 30h; OT 7.5h

ECTS: 5,5

Área disciplinar: Biotecnologia

Objetivos de aprendizagem (conhecimentos, aptidões e competências a desenvolver pelos estudantes):

A UC visa desenvolver as capacidades de modelação em química e bioquímica, incluindo a modelação de proteínas e da sua interacção com outras moléculas. Os estudantes irão estudar a validade e aplicabilidade dos métodos semi-empíricos e ab initio, e das abordagens DFT, bem como as noções básicas de mecânica e dinâmicas moleculares, de docking de proteínas a ligandos e interacções proteína- proteína.

Usando o conteúdo desta UC os estudantes serão capazes de:

- Escolher as técnicas adequadas para modelar os vários problemas relativos à estrutura;
- Planear e executar os cálculos necessários; - Interpretar e analisar os resultados. Os estudantes desenvolverão as capacidades fundamentais de modelação de estruturas, com aulas práticas focadas em levar os estudantes a trabalhar de forma crescentemente independente. É uma UC companheira de "Laboratório de Bioinformática" que se encontra organizada de modo a que os estudantes desenvolvam os seus próprios projetos de simulação

Conteúdos programáticos:

1. Introdução – estrutura atómica e molecular; ligações e interacções; a equação de Schrödinger e a sua aplicação; software de modelação.

2. Química computacional – métodos semi-empíricos, DFT e ab initio; características, aplicação e limitações.
3. Química computacional – modelos implícitos e explícitos para fases condensadas.
4. Modelação de proteínas – modelação por homologia e modelação ab initio.
5. Modelação de proteínas – mecânica molecular e dinâmica molecular aplicadas a questões biológicas; campos de forças, aplicação e limitação.
6. Lípidos e membranas – abordagens computacionais.
7. Interações ligando-proteínas – técnicas de docking, aplicações e limitações; análise pós-docking – refinamentos baseados em química quântica e em dinâmica molecular.
8. Interações entre proteínas – o interactoma; ferramentas de docking proteína-proteína.

Bibliografia principal:

Cramer, C.J., Essentials of Computational Chemistry: Theories and Models, Wiley, ISBN 978-0-470-09182-1.

Jensen, F., Introduction to Computational Chemistry, Wiley, ISBN 978-0-470-01186-7.

Rogers, D.W., Computational Chemistry Using the PC, Wiley-Interscience, ISBN 978-0-471-42800-8.

Tsai, C.S., An Introduction to Computational Biochemistry, Wiley-Liss, ISBN 978-0-471-40120-9.

Kukol, A., (ed.), Molecular Modeling of Proteins, Humana Press, ISBN 978-1-58829-864-5.

Xu, Y., Xu, D., Liang, D., (eds.), Computational Methods for Protein Structure Prediction and Modeling – 2 volumes, Springer, ISBN 978-0-387-68372-0 (vol 1), ISBN 978-1-4419-2206-9 (vol 2).

