



UNIVERSIDADE FEDERAL DE UBERLÂNDIA



FICHA DE COMPONENTE CURRICULAR

CÓDIGO: _____	COMPONENTE CURRICULAR: <u>INTRODUÇÃO À BIOFÍSICA MOLECULAR E COMPUTACIONAL</u>	
UNIDADE ACADÊMICA OFERTANTE: <u>INSTITUTO DE FÍSICA</u>		SIGLA: <u>INFIS</u>
CH TOTAL TEÓRICA: <u>60</u>	CH TOTAL PRÁTICA: <u>00</u>	CH TOTAL: <u>60</u>

OBJETIVOS

1. Fornecer ao estudante uma introdução à biofísica molecular teórica;
2. Fornecer ao estudante uma introdução aos principais métodos computacionais recorrentes em biofísica molecular;
3. Ajudar o estudante a criar uma visão da biofísica molecular como um campo “profundamente interdisciplinar” no qual a revelação da natureza de mecanismos por trás do funcionamento de organismos vivos é uma tarefa interdisciplinar para todo o ensemble de ciências naturais.

EMENTA

1. Revisão de Mecânica Estatística; 2. Conformações de biopolímeros (ácidos nucleicos e proteínas); 3. Introdução à Dinâmica de biopolímeros; 4. Métodos Monte Carlo para simulações moleculares.

PROGRAMA

1. Revisão de Mecânica Estatística
 - 1.1 O limite termodinâmico
 - 1.2 Termodinâmica de sistemas fechados: O ensemble canônico
 - 1.3 Equilíbrio termodinâmico e a natureza estatística da entropia
 - 1.4 Flutuações térmicas e a integral de caminho estatístico
 - 1.5 Transições de fase e de pseudofase
 - 1.6 Graus de liberdade relevantes
 - 1.7 Barreira de energia livre cinética e estado de transição
 - 1.8 Análise estatística microcanônica
2. Conformações de biopolímeros
 - 2.1 Transições globais em proteínas
 - 2.2 Forças moleculares em estruturas biológicas

- 2.3 Conformações de macromoléculas
- 3. Introdução à dinâmica de biopolímeros
 - 3.1 O modelo do oscilador harmônico
 - 3.2 Movimento browniano
 - 3.3 Mudanças conformacionais
 - 3.3.1 Associações moleculares
 - 3.3.2 Processos de taxa fundamentais
 - 3.3.3 Introdução à cinética da associação
 - 3.3.4 Cinética da transição hélice-novelo
- 4. Métodos Monte Carlo para simulações moleculares
 - 4.1 O método Monte Carlo
 - 4.2 Amostragem Monte Carlo de cadeia markoviana convencional
 - 4.3 Suavização de dados sistemáticos pelo uso de curvas de Bézier
 - 4.4 Processos markovianos e estratégias de amostragem estocástica
 - 4.5 Métodos de reponderação
 - 4.6 Atualizações Monte Carlo Elementares
 - 4.7 Amostragem Monte Carlo em Polímeros de reticulado
 - 4.8 Geradores de números aleatórios
 - 4.9 Alguns exemplos práticos de simulações Monte Carlo em polímeros

BIBLIOGRAFIA BÁSICA

BACHMANN, M. **Thermodynamics and Statistical Mechanics of Macromolecular Systems**. New York: Cambridge University Press, 2014.

DAUNE, M. **Molecular Biophysics: structures in motion**. New York: Oxford University Press, 1999.

JACKSON, M. B. **Molecular and cellular biophysics**. New York: Cambridge University Press, 2006.

BIBLIOGRAFIA COMPLEMENTAR

ALBERTS, B. et al. **Molecular Biology of the Cell**. New York: Garland, 2008.

DURAN, J. H. R. **Biofísica: conceitos e aplicações**. São Paulo: Pearson Education do Brasil, 2011.


HENEINE, I. F. **Biofísica básica**. São Paulo: Atheneu, 1984.

HOBBIE, R. K.; BRADLEY, J. R. **Intermediate Physics for Medicine and Biology**. New York, NY: Springer, 2007.

FREIFELDER, D. **Physical Biochemistry: applications to biochemistry and molecular biology**. New York: W.H. Freeman, 1982.

APROVAÇÃO

09 / 09 / 16


Universidade Federal de Uberlândia
Prof. Dr. Diego Merigue da Cunha
Coordenador do Curso de Física Médica
Portaria R N° 098/16

Carimbo e assinatura do Coordenador do Curso

13 / 09 / 16


Universidade Federal de Uberlândia
Prof. Dr. Tomé Mauro Schmidt
Diretor do Instituto de Física - INFIS
Portaria R N° 855/2013

Carimbo e assinatura do Diretor da
Unidade Acadêmica