



Código	Nome da Disciplina	Carga horária	
		BIOT073	Ferramentas <i>in silico</i> para a identificação de moléculas com potencial biológico
		Prática	

Oferta
() Semestral (x) Anual () Bienal

Modalidade
(x) Regular () Condensada

Ementa:

Visão geral sobre ferramentas computacionais que podem ser utilizadas para a identificação de moléculas com potencial biológico

Conteúdo Programático:

Origem dos fármacos
 Introdução a modelagem molecular;
 Ferramentas computacionais para a descoberta de fármacos
 Acoplamento molecular
 Triagem Virtual;
 Triagem Virtual Inversa;
 Dinâmica Molecular;
 SAR/QSAR
 Modelagem Comparativa
 Métodos híbridos (QM/MM)
 De novo
 ADMET

Avaliação:



A avaliação como um processo constante e contínuo, a qual será demarcada pela observação direta e através da participação do acadêmico.

Seminários e demais atividades desenvolvidas em sala de aula

Bibliografia:

1. Young, David C. Computational drug desing. New Jersey. Wiley. 2009. 321p.
2. Bourne, Philip E.; Weising, Helge. Strucutural bioinformatics. New Jersey. Wiley, 2003. 675p.
3. Abraham, Donald J.; Rotella, David. Burger's Medicinal Chemistry, Drug Discovery and Development. 7 ed. 8 volumes. Wiley, 2010, 6416p.
4. Patrick, Graham L. An introduction to medicinal chemistry. 4. Ed. Oxford. Oxford University Press. 2017, 832p.
5. Xiong, Jin. Essential Bioinformatics. New York. Combridge University Press. 2012 362p.
6. Holtje, Hans-Dieter, Folkers Gerd. Molecular modeling: basic principles and applications. New York. Cambridge-Tokyo. 2008, 320p.
7. Doucet, Jean-Pierre; Weber, Jacques. Computer-Aided Molecular design: Theory and applications. New York. Academic Press. 1996, 511p.
8. Larson, Richard S. Bioinformatics and drug Discovery. New Jersey. Humana Press. 2019, 324p.
9. Cramer, Christopher J. Essentials of computational chemistry: theory and models. England. John Wiley & Sons Ltd. 2004, 607p.

Periódicos:

Bioorganic & Medicinal Chemistry
Journal of Molecular Graphics and Modelling
Journal of the American Chemical Society
Journal of the Brazilian Chemical Society
International Journal of Quantum Chemistry
Bioinformatics
Journal of Computer-Aided Molecular Design
Computational and Theoretical Chemistry



Periódicos:

Bioorganic & Medicinal Chemistry
Journal of Molecular Graphics and Modelling
Journal of the American Chemical Society
Journal of the Brazilian Chemical Society
International Journal of Quantum Chemistry
Bioinformatics
Journal of Computer-Aided Molecular Design
Computational and Theoretical Chemistry
