

**UNIVERSIDADE FEDERAL DE LAVRAS PRÓ -
REITORIA DE PÓS-GRADUAÇÃO
COORDENADORIA DE PÓS-GRADUAÇÃO STRICTO SENSU**

DISCIPLINA

Código	Denominação	Crédito(s) (*)	Carga Horária		
			Teórica	Prática	Total
PQI 531	Tópicos Especiais - Introdução a Modelagem Molecular de Fármacos	04	60	00	60
DEPARTAMENTO		PROFESSOR(ES)			
DQI		Daiana Teixeira Mancini			

EMENTA: (Síntese do Conteúdo)

- A disciplina contempla a introdução ao estudo de modelagem molecular, os fundamentos da metodologia de *docking*; modelagem por homologia; simulações de dinâmica molecular; relações quantitativas estrutura-atividade (QSAR). Discussão de artigos científicos envolvendo essas metodologias de cálculo.

ASSINATURA(S): _____

Aprovado na Assembléia Departamental em _____ / _____ / _____

Lavras, ____ / ____ / ____

Chefe do Departamento

CONTEÚDO PROGRAMÁTICO

1. INTRODUÇÃO

- 1.1. Apresentação de alunos e professor
- 1.2. Apresentação do plano de curso
- 1.3. Metodologia de ensino-aprendizagem e avaliação
- 1.4. A disciplina no currículo e integração com outras disciplinas
- 1.5. A disciplina de formação do profissional e da pessoa

2. MODELAGEM MOLECULAR

- 2.1 Métodos quânticos.
- 2.2 Campos de Força.
- 2.3 *Docking molecular*;
 - 2.3.1 Modelo chave-fechadura;
 - 2.3.2 Algoritmos de otimização.
- 2.4 Construção de modelos por homologia;
 - 2.4.1 Identificação e seleção de proteínas-molde;
 - 2.4.2 Alinhamentos das sequências dos resíduos;
 - 2.4.3 Validações.
- 2.5 Simulações de dinâmica molecular;
 - 2.5.1 Algoritmos de integração;
 - 2.5.2 Controle de temperatura e pressão;
 - 2.5.3 Condições iniciais para simulação.
- 2.6 QSAR;
 - 2.6.1 Principais descritores;
 - 2.6.2 Tipos de QSAR;
 - 2.6.3 Exemplo de aplicação.
- 2.7 Discussões de artigos científicos.

3. AVALIAÇÃO

- 3.1. Avaliação do conteúdo do curso
- 3.2. Avaliação da atuação do aluno
- 3.3. Avaliação da atuação do professor
- 3.4. Avaliação das condições materiais e físicas em que se desenvolve o curso

BIBLIOGRAFIA BÁSICA

1. MORGON, N. H.; COUTINHO, K. **Métodos de Química Teórica e Modelagem Molecular.** 1ª ed. Livraria da Física, 2007.
2. LEACH, A. R. **Molecular Modelling: Principles and Applications** (2nd Edition) 2nd Edition, 2001.
3. BERMAN, H. M. et al. **The Protein Data Bank.** Nucleic acids research, v.28, n. 1, p.235-242, 2000.

BIBLIOGRAFIA COMPLEMENTAR

1. NAMBA, A. M.; DA SILVA, V. B.; DA SILVA, C. H. T. P. **Dinâmica molecular: teoria e aplicações em planejamento de fármacos.** Eclética Química. v. 33, n. 4, p. 13–24, 2008.
2. SANTOS FILHO, O. A.; ALENCASTRO, R. B. **Modelagem de proteínas por homologia.** Química Nova. v. 26, n. 2, p. 253–259, 2003.
3. BARREIRO, E. J.; RODRIGUES, C. R. **Modelagem molecular: uma ferramenta para o planejamento racional de fármacos em química medicinal.** Química Nova. v.20, n.1, p. 1–11, 1997.
4. Artigos de bancos de dados.