

EMENTA DE DISCIPLINA: COMPUTER-AIDED DRUG DESIGN 2 - CADD II			SIGLA: CAD II	
Curso: Mestrado em Ciências Farmacêuticas				
INFORMAÇÕES BÁSICAS				
Professor responsável: Alex Gutterres Taranto				
Nível: Pós-Graduação		Obrigatório ou optativa: optativa		
Área de Concentração: Insumos Farmacêuticos, Compostos Bioativos e Medicamentos.				
CARGA HORÁRIA				
Teórica: 30 horas	Prática: -	Total: 30 horas	Créditos: 2	
PRÉ-REQUISITO				
- <i>Computer-Aided Drug Design - CADD I</i>				
EMENTA				
The application of computational medicinal chemistry methods to develop new drugs.				
OBJETIVOS				
Discuss all aspects of molecular modeling on drug discovery and development of new bioactive compounds.				
CONTEÚDO PROGRAMÁTICO				
<ul style="list-style-type: none"> - Programming; Linux Environment and Phyton - Structure Based-Drug Design: Homology Modeling, Molecular Dynamics Simulations, Docking, Virtual Screening, Pharmacophoric search - Ligand based-Drug Design (introduction): QSAR 				
CRITÉRIOS DE AVALIAÇÃO				
The student will evaluate by a seminar in each class.				
BIBLIOGRAFIA BÁSICA				
<ul style="list-style-type: none"> - Holtje, H.-D; Sippl, W.; Rognan, D.; Folkers, G. Molecular Modeling Basic Principles and Applications, Second Ed., Wiley-VCH, 2008. - Taha, M. O. Virtual Screening, InTech, 2012. 				
BIBLIOGRAFIA COMPLEMENTAR				
Journal Chemical Information and Modeling Journal of Molecular Modeling and Graphics Journal of Molecular Modeling				