

| | | | |
|---|-------------------|------------------------|--------------------|
| EMENTA DE DISCIPLINA: Computer-Aided Drug Design | | | SIGLA: CADD |
| Curso: Mestrado em Ciências Farmacêuticas | | | |
| INFORMAÇÕES BÁSICAS | | | |
| Professor responsável: Alex Gutterres Taranto | | | |
| Nível: Pós-Graduação | | Optativa | |
| Área de Concentração: Insumos Farmacêuticos, Compostos Bioativos e Medicamentos. | | | |
| CARGA HORÁRIA | | | |
| Teórica: 30 horas | Prática: - | Total: 30 horas | Créditos: 2 |
| PRÉ-REQUISITO | | | |
| O aluno deve ter cursado Seminários I. | | | |
| EMENTA | | | |
| Introduction of the basic concepts of Computer-Aided Drug Design: Data Bank, Comparative Modeling, Docking, Virtual Screening, QSAR, Molecular Dynamics Simulations, QM/MM calculations, Free Energy calculations. | | | |
| OBJETIVOS | | | |
| Discuss all aspects of molecular modeling on drug discovery and development of new bioactive compounds. | | | |
| CONTEÚDO PROGRAMÁTICO | | | |
| <ul style="list-style-type: none"> - Introduction - Drug Bank, Protein Data Bank, Wombat - Swiss Model/Modeller; - Autodock Vina, Gold, MOE, Open Eye. - QSAR: COMFA - Amber - Gaussian - Mopac | | | |
| 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 | | | |
| Review paper of each topic in the Journal Chemical Information and Modeling (principally but not only) | | | |