

EMENTA DE DISCIPLINA: Modelagem Molecular e Bioinformática			
SIGLA: MMB			
Curso: Mestrado em Ciências Farmacêuticas			
INFORMAÇÕES BÁSICAS			
Professor responsável: Alex Gutterres Taranto			
Nível: Mestrado		Obrigatória ou optativa: Optativa	
Áreas de Concentração: Biofísica Molecular; Química de Macromoléculas; Físico-Química Orgânica; Ciência da Computação; Química Medicinal, Bioinformática.			Pré-requisito: não há
CARGA HORÁRIA			
Teórica: 30 horas	Prática: 15 horas	Total: 45 horas	Créditos: 3
EMENTA			
Conceitos básicos de Modelagem Molecular, Discussão de modelos e níveis teóricos (Métodos de Mecânica Molecular, <i>ab initio</i> , Teoria do Funcional de Densidade, Híbridos), Dinâmica Molecular; Métodos de Otimização de Estruturas, Modelagem Comparativa, Bancos de Dados em Biologia, Alinhamento Seqüencial e Estrutural.			
OBJETIVOS			
Transmitir aos alunos conhecimentos básicos de biologia e química computacional capacitando-os para trabalhar com os principais softwares da área e em indústria farmacêutica com o desenvolvimento de fármacos.			
CONTEÚDO PROGRAMÁTICO:			
Introdução; Introdução ao ambiente de Linux; Métodos Teóricos; Métodos Quânticos; Métodos de Campo de Força; Métodos Híbridos; Minimização de energia; Métodos de Simulação; Dinâmica Molecular; Monte Carlo; Análise Conformacional; Virtual Screening; Docking; Cálculo de Energia Livre; Banco de Dados; Estrutura de Biomoléculas; Alinhamento Seqüencial; Predição de Estruturas Secundárias e Terciárias. Principais Softwares da Área: Rasmol, Swiss-model, Modeller, Gaussian, Gaussview, Amber, VMD, AutoDock, DSVisualizer.			
CRITÉRIOS DE AVALIAÇÃO			
Avaliação teórica, prática e apresentação de seminários.			
BIBLIOGRAFIA BÁSICA			
<ul style="list-style-type: none"> - LEACH, A. R.; Molecular Modelling: Principles and applications. 2a ED. Pearson Education Limited, 2001. - GIBAS, C.; JAMBERCK, P.; Desenvolvendo Bioinformática, O'Reilly, 2001 - CARLONI, P.; ALBER, F.; Quantum Medicinal Chemistry: Methods and Principles in Medicinal Chemistry, vol 17, Wiley-VCH, 2003. - MORGAN, N. H.; COUTINHO, K.; Métodos de Química Teórica e Modelagem Molecular, Editora Livraria da Física, 2007. - HÖLTJE, H.-D; SIPPL, W.; ROGNAN, D.; FOLKERS, G. Molecular Modeling Basic Principles and Applications, Second Ed., Wiley-VCH, 2003. - SCHLICK, T. Molecular Modeling and Simulation: an Interdisciplinary Guide, V. 21, Springer-Verlag New York, Inc. 2002. 			
BIBLIOGRAFIA COMPLEMENTAR			
<ul style="list-style-type: none"> - SÁNCHEZ, R.; SALI, A.; Comparative Protein Structure Modeling in Genomics, J. Comp. Physics, 151, 388-401, 1999. - SALI, A.; BLUNDELL, T. L. Comparative Protein Modelling by Satisfaction of Spatial Restraints. J. Mol. Biol. 234, 779-815, 1993. - FISCHMAN, S. G.; HONIG, B. Structural Genomics: Computational methods for structure analysis. Protein Science, 12, 1813-1821, 2003. 			