

EMENTA DE DISCIPLINA: MODELAGEM MOLECULAR: DESENVOLVIMENTO DE FÁRMACOS UTILIZANDO METODOLOGIAS IN SILICO			SIGLA:
Curso: Mestrado em Ciências Farmacêuticas			
INFORMAÇÕES BÁSICAS			
Pós Doutoranda responsável: Amanda Luisa da Fonseca			
Nível: Pós-Graduação		Obrigatório ou optativa: optativa	
Área de Concentração: Mestrado em Ciências Farmacêuticas		Pré-requisito: -	
CARGA HORÁRIA			
Teórica: 9 horas	Prática: 6 horas	Total: 15 horas	Créditos: 1
EMENTA			
Estudo da modelagem molecular. Conhecimento de programas e softwares utilizados em modelagem molecular. Princípios fundamentais da modelagem. Modelagem molecular e bioinformática. Modelagem molecular e o desenvolvimento de fármacos. Integração do conhecimento de modelagem molecular e aplicação em projetos de intervenção com enfoque para a sociedade.			
OBJETIVOS			
Permitir ao pós-graduando compreender a importância e aplicação da modelagem molecular.			
CONTEÚDO PROGRAMÁTICO			
-Modelagem molecular -Metodologias <i>in silico</i> -Modelagem comparativa/Homologia -Programas e softwares -Modelagem molecular em projetos de intervenção para a sociedade			
CRITÉRIOS DE AVALIAÇÃO			
Seminários, estudos dirigidos, projeto de intervenção.			
BIBLIOGRAFIA BÁSICA			
Berman, H. M., J. Westbrook, et al. (2000). "The Protein Data Bank." <u>Nucleic Acids Research</u> 28 (1): 235-242. Bordoli, L., F. Kiefer, et al. (2008). "Protein structure homology modeling using SWISS-MODEL workspace." <u>Nat. Protocols</u> 4 (1): 1-13. Morgon, N. H. and K. Coutinho (2007). "Métodos de Química Teórica e Modelagem Molecular." <u>Livraria da Física</u> : 539pp.			
BIBLIOGRAFIA COMPLEMENTAR			
Abraham, M., B. Hess, et al. (2015). "GROMACS: Groningen Machine for Chemical Simulations-User Manual." <u>Royal Institute of Technology and Uppsala University</u> . Bruschweiler, R. and S. Showalter (2007). "Validation of molecular dynamics simulations of biomolecules using NMR spin relaxation as benchmarks: Application to the AMBER99SB force field." <u>J Chem Theory Comput</u> 3 : 961 - 975. Case, D., T. Cheatham, et al. (2005). "The AMBER biomolecular simulation programs." <u>J Comput Chem</u> 26 : 1668 - 1688. Fonseca, A. L. d., R. R. Nunes, et al. (2016). "Docking, QM/MM, and molecular dynamics simulations of the hexose transporter from Plasmodium falciparum (PfHT)." <u>Journal of Molecular Graphics and Modelling</u> 66 : 174-186. Gumbart, J., Y. Wang, et al. (2005). "Molecular dynamics simulations of proteins in lipid bilayers." <u>Current Opinion in Structural Biology</u> 15 (4): 423-431. Pasenkiewicz-Gierula, M., K. Baczynski, et al. (2016). "Computer modelling studies of the bilayer/water interface." <u>Biochimica et Biophysica Acta (BBA) - Biomembranes</u> 1858 (10): 2305-2321.			