

CURSO/EMENTA: “Ferramentas in silico para a identificação alvos e moléculas com potencial biológico”

Carga horária: 45 h

Ministrante: Prof. Dr. Bruno Andrade

Número de discentes: até 30

Pré-requisitos: Conhecimento básico em bioquímica de proteínas e genética molecular. Recomenda-se que cada aluno traga seu laptop.

Ementa:

Abordar os principais métodos e ferramentas utilizadas dentro da Bioinformática e da Química Computacional, aplicados à busca de novos alvos moleculares em potencial assim como moléculas isoladas de plantas, animais ou microrganismos, que possam modulá-los ou inibi-los.

Programa:

- Bancos de dados de proteínas (T/P)
- Bancos de dados de moléculas bioativas (T/P)
- Introdução à modelagem molecular (T/P)
- Modelagem por Homologia (T/P)
- Acoplamento molecular (T/P)
- Triagem virtual (T/P)
- Triagem virtual inversa (T/P)
- Tópicos em Dinâmica Molecular (T)

Bibliografia:

1. Young, David C. Computational drug desing. New Jersey. Wiley. 2009. 321p.
2. Bourne, Philip E.; Weising, Helge. Strucutral bioinformatics. New Jersey. Wiley, 2003. 675p.
3. Abraham, Donald J.; Rotella, David. Burger's Medicinal Chemistry, Drug Discovery and Development. 7 ed. 8 volumes. Wiley, 2010, 6416p.
4. Patrick, Graham L. An introduction to medicinal chemistry. 4. Ed. Oxford. Oxford University Press. 2009, 772p.
5. Xiong, Jin. Essential Bioinformatics. New York. Combridge University Press. 2006, 362p.

6. Holtje, Hans-Dieter, Folkers Gerd. Molecular modeling: basic principles and applications. New York. Cambridge-Tokyo. 1996, 200p.
7. Doucet, Jean-Pierre; Weber, Jacques. Computer-Aided Molecular design: Theory and applications. New York. Academic Press. 1996, 511p.
8. Larson, Richard S. Bioinformatics and drug Discovery. New Jersey. Humana Press. 2006, 455p.
9. Cramer, Christopher J. Essentials of computational chemistry: theory and models. England. John Wiley & Sons Ltd. 2004, 607p.

Periódicos:

Bioorganic & Medicinal Chemistry

Journal of Molecular Graphics and Modelling

Journal of the American Chemical Society

Journal of the Brazilian Chemical Society

International Journal of Quantum Chemistry Bioinformatics

Journal of Computer-Aided Molecular Design

Computational and Theoretical Chemistry