

MODELAGEM MOLECULAR DE COMPOSTOS BIOATIVOS

Créditos: 03

Professores: Aluísio Marques da Fonseca - Lívia Paulia Dias Ribeiro - Jeferson Falcão do Amaral

Tipo de componente: optativo

Ementa: Introdução à modelagem molecular e sua aplicação no estudo de compostos bioativos. Conceitos de mecânica molecular e química quântica aplicados à modelagem. Métodos de docking molecular e triagem virtual. Dinâmica molecular e simulações de sistemas biológicos. Predição de propriedades físico-químicas e farmacocinéticas (ADME/T). Aplicações na descoberta e desenvolvimento de fármacos, agroquímicos e biomateriais. Uso de ferramentas computacionais para análise de interações intermoleculares.

Bibliografia Básica:

Leach, A. R. (2001). *Molecular Modelling: Principles and Applications*. 2nd ed. Pearson.

Cramer, C. J. (2013). *Essentials of Computational Chemistry: Theories and Models*. 2nd ed. Wiley.

Jensen, F. (2017). *Introduction to Computational Chemistry*. 3rd ed. Wiley.

Kitchen, D. B., Decornez, H., Furr, J. R., & Bajorath, J. (2004). Docking and scoring in virtual screening for drug discovery: methods and applications. *Nature Reviews Drug Discovery*, 3(11), 935-949.

Bibliografia Complementar:

Sousa, S. F., Ribeiro, A. J. M., & Coimbra, J. T. S. (2020). Molecular docking and structure-based virtual screening in drug discovery. *Molecules*, 25(17), 4203.

Wang, R., Fang, X., Lu, Y., & Wang, S. (2004). The PDBbind database: collection of binding affinities for protein–ligand complexes with known three-dimensional structures. *Journal of Medicinal Chemistry*, 47(12), 2977-2980.

Gohlke, H., & Klebe, G. (2002). Approaches to the description and prediction of the binding affinity of small-molecule ligands to macromolecular receptors. *Angewandte Chemie International Edition*, 41(15), 2644-2676.