



UNIVERSIDADE FEDERAL DE PERNAMBUCO
PRO-REITORIA PARA ASSUNTOS DE PÓS-GRADUAÇÃO E PESQUISA
CENTRO DE CIÊNCIAS DA SAÚDE
DEPARTAMENTO DE CIÊNCIAS FARMACÊUTICAS
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM CIÊNCIAS FARMACÊUTICAS



DISCIPLINA: TÓPICOS ESPECIAIS II - INTRODUÇÃO À MODELAGEM MOLECULAR DE FÁRMACOS

PROFESSOR RESPONSÁVEL: Dra. Maria do Carmo Alves de Lima
Dr. Marcelo Montenegro Rabello

CRÉDITOS: 03

CARGA HORÁRIA: 45 horas

CÓDIGO: CF-941

NÍVEL: Mestrado e Doutorado

EMENTA

O conteúdo programático do curso que será ministrado pelo professor Marcelo Montenegro, estará vinculado ao Programa de Pós-Graduação em Ciências Farmacêuticas e vai incluir os seguintes temas:

- Introdução ao estudo da modelagem molecular;
- Aplicação da modelagem molecular no planejamento de fármacos;
- Abordagem de conceitos fundamentais envolvidos na relação entre moléculas bioativas e alvos biológicos;
- Apresentação do banco de dados PDB e fundamentos da metodologia de *docking* molecular;
- Aplicação da modelagem molecular no estudo de complexos de inclusão envolvendo ciclodextrinas;
- Discussão de artigos científicos na área de farmacêutica com abordagens *in silico*.

OBJETIVO GERAL

Estudar a modelagem molecular e sua aplicação no planejamento de fármacos.

OBJETIVOS ESPECÍFICOS

- Apresentar ferramentas computacionais que possam auxiliar no projeto de pós-graduação dos alunos.
- Apresentar, de forma geral, as razões intermoleculares que justifiquem as interações entre fármaco (ligante) e alvo biológico (receptor).
- Definir os componentes fundamentais da metodologia de *docking*;
- Compreender os limites da técnica de *docking* e correlacionar os resultados *in silico* com os resultados de atividade biológica;
- Compreender a importância da modelagem molecular no planejamento de fármacos.

CONTEÚDO PROGRAMÁTICO

- Modelagem molecular.
- Interações intermoleculares entre ligante e receptor.
- Pesquisa em bancos de dados de proteínas.
- *Docking* molecular, algoritmos de otimização e funções de pontuação.
- Complexos de inclusão (ciclodextrinas).

METODOLOGIA DIDÁTICA

Aulas teóricas expositivas;
Discussão de artigos científicos e apresentação de seminários.

AVALIAÇÃO

Análise crítica e discussão de artigos científicos;
Apresentação de seminários;

REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

1. MORGON, N. H.; COUTINHO, K. Métodos de Química Teórica e Modelagem Molecular. 1ª ed. Livraria da Física, 2007.
2. MORRIS, G. M. et al. AutoDock4 and AutoDockTools4: Automated Docking with Selective Receptor Flexibility. J Comput Chem, v. 30, p.2785-2791, 2009.
3. JONES, G. et al. Development and validation of a genetic algorithm for flexible docking. Journal of molecular biology, v. 267, n. 3, p. 727-48, 4 abr.1997.
4. BERMAN, H. M. et al. The Protein Data Bank. Nucleic acids research, v.28, n. 1, p. 235-242, 2000.
5. HUEY, R. et al. Grid-Based Hydrogen Bond Potentials with Improved Directionality. Letters in Drug Design & Discovery, v. 1, n. 2, p. 178-183, 1abr. 2004.
6. Literatura especializada em periódicos como: European Journal of Medicinal Chemistry (Elsevier), Journal of Computational Chemistry (Wiley InterScience), Journal of Computer-Aided Molecular Design (Springer), Journal of Molecular Graphics and Modeling (Elsevier), Journal of Molecular Modeling (Springer).