SERVIÇO PÚBLICO FEDERAL
UNIVERSIDADE FEDERAL DE JATAÍ
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM QUÍMICA

I. IDENTIFICAÇÃO	
INSTITUTO: Ciências Exatas e Tecnológicas	
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM Química	
DOCENTE: Breno Almeida Soares	
CODIGO/DISCIPLINA: Tópicos especiais 2: Introdução à Modelagem Molecular	
DATA DE INÍCIO/ DATA FIM DA DISCIPLINA: 04/04/2024 a 18/07/2024	
HORÁRIO DA TURMA: Quinta / Período Matutino	
CARGA HORÁRIA TEÓRICA: 32h	*CARGA HORÁRIA PRÁTICA*: 0h
NÚMERO DE CRÉDITOS: 2	
SEMESTRE LETIVO DE OFERTA: 2024.1	

II. EMENTA

Principais conceitos e terminologias envolvendo a modelagem molecular e suas aplicações em química medicinal. Abordagem de conceitos fundamentais envolvidos na relação entre moléculas bioativas e alvos biológicos. Introdução dos principais modelos utilizados nos estudos de modelagem molecular (métodos clássicos x métodos quânticos). A abordagem fisiológica no planejamento de substâncias bioativas. Etapas no planejamento de fármacos. Apresentação e utilização do *Protein Data Bank* e fundamentos da metodologia de docagem molecular utilizando o programa GOLD. Apresentação de alguns servidores *on line* e programas gratuitos de visualização gráfica e construção de estruturas tridimensionais (MarvinSketch, PyMol, BIOVIA Discovery Studio Visualizer) necessários no preparo de ligantes e alvos biológicos que serão utilizados posteriormente nos estudos de docagem. Aplicação da modelagem molecular no estudo de receptores de serotonina complexados com agonistas e antagonistas. Discussão de artigos científicos que utilizam abordagens *in silico* no planejamento de substâncias bioativas.

III. OBJETIVO GERAL

Fornecer aos discentes os conceitos fundamentais acerca da modelagem molecular e sua aplicação no entendimento da ação de moléculas bioativas e no planejamento de fármacos.

IV. OBJETIVO ESPECÍFICOS

Despertar e/ou estimular o interesse do aluno em entender as bases moleculares da ação biológica e a importância da modelagem molecular no planejamento de fármacos;
Apresentar ferramentas computacionais que possam auxiliar o aluno na execução de seu projeto de pesquisa;
Capacitar o aluno a correlacionar resultados *in silico* com resultados de atividade biológica.

V. METODOLOGIA E RECURSOS

Aulas teóricas com o auxílio de recursos audiovisuais com estratégias voltadas para incentivar o senso crítico de cada discente.

VI. PROCESSOS E CRITÉRIOS DE AVALIAÇÃO
Avaliação continuada ao longo de todo o curso baseada na presença, participação e comportamento do aluno em sala de aula; Apresentação de Seminário; Participação em eventuais discussões de artigos científicos que serão disponibilizados ao longo do curso.

VII. CONTEÚDO PROGRAMÁTICO (discriminação, de acordo com a ementa, do conteúdo a ser ministrado durante o curso)	
DISCRIMINAÇÃO	CH
Apresentação do plano de ensino. Nivelamento da turma. O que é modelagem molecular e quais são suas utilidades em Química Medicinal. Métodos independentes do receptor/enzima e métodos dependentes do receptor/enzima no planejamento de fármacos.	4h
Abordagem fisiológica no planejamento de substâncias bioativas. Apresentação e utilização do *Protein Data Bank*, banco de dados de biomacromoléculas de acesso público.	4h
Principais modelos utilizados nos estudos de modelagem molecular (métodos clássicos, métodos quânticos e métodos comparativos). Fundamentos da metodologia de docagem molecular. Tipos de interações envolvidas. Tipos de algoritmos de busca conformacional e principais tipos de funções de pontuação empregadas pelos programas de docagem.	8h
Utilização de servidores *on line* e programas gratuitos de modelagem molecular para construção de ligantes e preparo de alvos biológicos obtidos no *Protein Data Bank* que serão utilização nos estudos de docagem. Funcionalidades básicas do programa de docagem GOLD. Análise da estrutura tridimensional e do sítio ativo de receptores 5-HT_2 complexados com ligantes agonistas e antagonistas. Análise e interpretação de resultados de docagem e limitações desse método.	12h
Discussão de artigos científicos que utilizam abordagens *in silico* no planejamento de substâncias bioativas.	4h

VI. BIBLIOGRAFIA

Básica:

- MORGON, N. H.; COUTINHO, K. **Métodos de Química Teórica e Modelagem Molecular**. 1ª ed. Livraria da Física.
- ANDREI, C.C. et al. (Org.); **Da química medicinal à química combinatória e modelagem molecular**: um curso prático, Manole, São Paulo, 2003.
- BARREIRO, E.J., FRAGA, C.A.M.; **Química medicinal: as bases moleculares da ação dos fármacos**, 3ª Ed, ArtMed, Porto Alegre, 2015.
- THOMAS, G.; **Química medicinal: uma introdução**, Guanabara Cougan, Rio de Janeiro, 2003.
- VERLI, H. **Bioinformática: da biologia à flexibilidade molecular**. Sociedade Brasileira de Bioquímica e Biologia Molecular, 2014 Creative Commons License (e-book: https://lume.ufrgs.br/bitstream/handle/10183/166105/001012172.pdf?sequence=1&isAllowed=y)

Complementar:

- KOROLKOVAS, A., BURCKHALTER, J.H.; **Química farmacêutica**, Guanabara Cougan, Rio de Janeiro, 1988. SOLOMONS, T. W. G.; Fryhle, C. B. **Química Orgânica,** 12ª Ed, Vol. I e II, LTC, 2018.
- HINCHLIFFE, A. **Molecular Modelling for Beginners**. 2nd Edition. John Willey&Sons. 2008.
- Artigos científicos de revistas indexadas da área de Modelagem Molecular aplicada a Química Medicinal.

Jataí, 31 de janeiro de 2024

Prof. Breno Almeida Soares
Docente da disciplina