

Nome do Componente Curricular: Modelagem Molecular	
Pré-requisitos: Biologia Estrutural	
Carga Horária Total: 72h	
Carga Horária Prática: 36 h	Carga Horária Teórica: 36h
<p>Objetivos</p> <p>Gerais: Introdução à teoria e prática da modelagem molecular.</p> <p>Específicos: Curso teórico-prático de introdução aos principais conceitos da modelagem molecular desde a análise de campos de forças moleculares aos principais métodos de otimização de estruturas biológicas.</p>	
<p>Ementa: Métodos de bioinformática estrutural. Modelagem molecular. Mecânica Molecular. Dinâmica molecular. Cálculos energéticos. Desenho racional de fármacos.</p>	
<p>Conteúdo Programático:</p> <ul style="list-style-type: none"> • Modelos moleculares • Campos de Forças Moleculares • Mecânica Molecular • Potenciais híbridos • Métodos de otimização • Análise de modos normais • Simulações de dinâmica molecular. • Cálculos energéticos • Desenho racional de inibidores 	
<p>Metodologia de Ensino Utilizada: Aulas expositivas e atividades práticas.</p>	
<p>Recursos Instrucionais Necessários: Sala de aula o com lousa e projetor multimídia. Laboratório computacional.</p>	
<p>Critérios de Avaliação: O sistema de avaliação será definido pelo docente responsável pela UC no início das atividades letivas e divulgado aos alunos. O sistema adotado deve contemplar o processo de ensino e aprendizagem estabelecido neste Projeto Pedagógico, com o objetivo de favorecer o progresso do aluno ao longo do semestre. Para isto, as avaliações deverão ser ponderadas de maneira crescente ou, ainda, propiciar alternativas de recuperação, como provas substitutivas e/ou aplicação de trabalhos adicionais. A promoção do aluno na UC obedecerá aos critérios estabelecidos pela Pró-Reitoria de Graduação, tal como discutido no projeto pedagógico do curso.</p>	
<p>Bibliografia</p> <p>Básica:</p> <ul style="list-style-type: none"> • LEACH, A.R. Molecular Modelling, Principles and Applications. 2nd Ed. Prentice 	

Hall 2001.

- SCHLICK, T. Molecular Modeling and Simulation. Springer 2002.
- CRAMER, C.J. Computational Chemistry. Wiley 2002.

Complementar:

- TINOCO, Ignacio; SAUER, Kenneth; WANG, James C.; PUGLISI, Joseph D. Physical chemistry: principles and applications in biological sciences. 4 ed. Upper Saddle, NJ: Prentice Hall, 2003.
- BRANDEN, C.; TOOZE, J. Introduction to Protein Structure, 2nd Ed., Garland, 1999.
- MILLER, TANNER. Essentials of Chemical Biology. Structure and Dynamics of Biological Macromolecules. Wiley 2013.
- KINSER, Jason. Python for bioinformatics. Sudbury, Massachusetts: Jones and Bartlett Publishers, 2009.
- MCQUARRIE, Donald A. Quantum chemistry. 2 ed. Sausalito, California: University Science Books, 2007.