

Campus: São José dos Campos		
Curso (s): BBT,BCT		
Unidade Curricular (UC): Modelagem Molecular		
Unidade Curricular (UC): <i>Molecular Modeling</i>		
Unidade Curricular (UC): <i>Modelaje Molecular</i>		
Código da UC: 5861		
Docente Responsável/Departamento: Prof. Dr. Martin Wurtele		Contato (e-mail): martin.wurtele@unifesp.br
Docente (s) Colaborador/a (es/as)/Departamento (s):		Contato (e-mail): [opcional]
Ano letivo: 2024	Termo: 7º	Turno: Integral
Nome do Grupo/Módulo/Eixo da UC (se houver):		Idioma predominante em que a UC será oferecida: <input checked="" type="checkbox"/> Português <input type="checkbox"/> English <input type="checkbox"/> Español <input type="checkbox"/> Français <input type="checkbox"/> Libras <input type="checkbox"/> Outro:
UC: <input type="checkbox"/> Fixa <input checked="" type="checkbox"/> Eletiva <input type="checkbox"/> Optativa	Oferecida como: <input checked="" type="checkbox"/> Disciplina <input type="checkbox"/> Módulo <input type="checkbox"/> Estágio <input type="checkbox"/> Outro:	Oferta da UC: <input checked="" type="checkbox"/> Semestral <input type="checkbox"/> Anual
Ambiente Virtual de Aprendizagem: <input checked="" type="checkbox"/> Moodle <input type="checkbox"/> Classroom <input type="checkbox"/> Outro: <input type="checkbox"/> Não se aplica		
Pré-Requisito (s) - Indicar Código e Nome (s) da (s) UC: Biologia Estrutural (5853)		
Carga horária total (em horas): 72		
Carga horária teórica (em horas): 36	Carga horária prática (em horas): 36	Carga horária de extensão (em horas, se houver):0
Se houver atividades de extensão, indicar código e nome do projeto ou programa vinculado na Pró-Reitoria de Extensão e Cultura (ProEC):		
Ementa: Métodos de bioinformática estrutural. Modelagem molecular. Mecânica Molecular. Dinâmica molecular. Cálculos energéticos. Desenho racional de fármacos.		
Conteúdo programático: <ul style="list-style-type: none"> • Modelos moleculares • Métodos computacionais incluindo programação em Python e métodos de aprendizado de máquina • Campos de Forças Moleculares e Mecânica Molecular • Simulações de dinâmica molecular. • Cálculos energéticos • Desenho racional de inibidores 		
Objetivos:		
Gerais:		

Introdução à teoria e prática da modelagem molecular.

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.

Metodologia de ensino:

Aulas expositivas, experimentos computacionais.

Avaliação:

Provas

Bibliografia:

Básica:

- 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.

Cronograma: *[opcional]*