

QUI 2637 **Tópicos Especiais em Físico-Química - Planejamento de Fármacos**

CARGA HORÁRIA TOTAL: 30 HORAS CRÉDITOS: 2

PRÉ-REQUISITO(S):: Nenhum

OBJETIVOS Dar noções fundamentais sobre o planejamento de fármacos utilizando métodos computacionais. O curso visa introduzir os conceitos da Química Medicinal relacionados a gênese de um novo Fármaco. Procura familiarizar o aluno com os aspectos e estratégias que podem influenciar no planejamento racional de novos Fármacos.

EMENTA: - Introdução e conceitos básicos - Planejamento Racional de Fármacos - Tipos de Fármacos, receptores e interações Fármaco-receptores - Estratégias do Planejamento de Fármacos - Parâmetros Físico-químicos no Planejamento de Novos Fármacos - Relação Estrutura Química e Atividade Biológica

PROGRAMA Triagem virtual, pesquisa por similaridade, planejamento baseado no ligante, planejamento baseado na estrutura, identificação do alvo, identificação do sítio de ligação, ancoragem molecular, relação estrutura-atividade, modelagem por homologia, dinâmica molecular, toxicologia in silico, regras de Lipinski, ADMET

AVALIAÇÃO Critério 12

BIBLIOGRAFIA PRINCIPAL Chemical drug design, Gupta, Girish Kumar, Kumar, Vinod. 2016 Walter de Gruyter GmbH, Berlin/Boston.
Drug Design Strategies : Quantitative Approaches. Livingstone, D., Davis, Andrew M., 2012, RSC Publishing, Cambridge, UK.
Computational Drug Design, Young, David C., 1st edition, 2009, Wiley-Interscience, New Jersey, USA.

BIBLIOGRAFIA COMPLEMENTAR J. B. Foresman and Æ Frisch, Exploring Chemistry with Electronic Structure Methods, 3rd ed., Gaussian, Inc.: Wallingford, CT, 2015. ISBN: 978-1-935522-03-4

NTAR

M.J. Abraham, D. van der Spoel, E. Lindahl, B. Hess, and the GROMACS development team, GROMACS User Manual version 2019, <http://www.gromacs.org>

LEACH, A. R. (2001). Molecular modelling: principles and applications. Harlow, England, Prentice Hall.

O. Trott, A. J. Olson, AutoDock Vina: improving the speed and accuracy of docking with a new scoring function, efficient optimization and multithreading, *Journal of Computational Chemistry* 31 (2010) 455-461.

Siavoush Dastmalchi, Maryam Hamzeh-Mivehroud, Babak Sokouti, *Methods and Algorithms for Molecular Docking-Based Drug Design and Discovery (Advances in Chemical and Materials Engineering)*, 1st Edition. IGI Global; Hershey, PA USA 2016.