**UNIVERSIDADE ESTADUAL DE SANTA CRUZ - UESC**

**PRÓ-REITORIA DE PESQUISA E PÓS-GRADUAÇÃO - PROPP**

**DEPARTAMENTO DE CIÊNCIAS BIOLÓGICAS - DCB**

**PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM GENÉTICA E BIOLOGIA MOLECULAR - PPGGBM**

### PROGRAMA DE DISCIPLINA

|  |  |
| --- | --- |
| **Código:** | CIB 385 |
| **Nome da disciplina:** | Ferramentas *in silico* para a identificação alvos e moléculas com potencial biológico |
| **Pré-requisitos:** |  |
| **Carga horária** | **Teórica:** 30 **Prática:** 30 **Total:** 60 |
| **Créditos:** | **Teórica:** 2 **Prática:** 1 **Total:** 2 |
| **Professor:** | Bruno Andrade e Gesivaldo Santos |
| **Assinatura:** |  |
| **Ementa:** | Abordar os principais métodos e ferramentas utilizadas dentro da Bioinformática, Química Computacional e Biologia de Sistemas, aplicados à busca de novos alvos moleculares em potencial assim como moléculas isoladas de plantas, animais ou microrganismos, que possam modulá-los ou inibi-los. |
| **Objetivos:** | Promover aos estudantes de pós-graduação os conhecimentos teóricos e práticos necessários para o uso de ferramentas da Bioinformática e Química Computacional, capacitando-os a manipulação e seleção de moléculas bioativas e seus respectivos alvos. |
| **Metodologia:** | Serão ministradas aulas teóricas expositivas e prática com o uso de computadores e programas de Bioinformática e Química Computacional. Serão propostos estudos dirigidos, apresentação e discussão de artigos científicos pertinentes ao conteúdo programático. |
| **Avaliação:** | Ao final da disciplina o aluno deverá apresentar os resultados das práticas desenvolvidas durante a disciplina, na forma de seminário, compondo 100% da nota. |
| **Conteúdo Programático:** | **-** Bancos de dados de proteínas  - Bancos de dados de moléculas bioativas  - Introdução à modelagem molecular  - Modelagem por Homologia  - Acoplamento molecular  - Triagem virtual  - Triagem virtual inversa  - Dinâmica Molecular  - Introdução à Biologia de Sistemas  - Análise de dados em Biologia de Sistemas  - Ferramentas *in silico* para Biologia de Sistemas |
| **Referências Bibliográficas:** | 1. Young, David C. Computational drug desing. New Jersey. Wiley. 2009. 321p.  2. Bourne, Philip E.; Weising, Helge. Strucutural bioinformatics. New Jersey. Wiley, 2003. 675p.  3. Abraham, Donald J.; Rotella, David. Burger's Medicinal Chemistry, Drug Discovery and Development. 7 ed. 8 volumes. Wiley, 2010, 6416p.  4. Patrick, Graham L. An introduction to medicinal chemistry. 4. Ed. Oxford.  Oxford University Press. 2009, 772p.  5. Xiong, Jin. Essential Bioinformatics. New York. Combridge University Press. 2006, 362p.  6. Holtje, Hans­Dieter, Folkers Gerd. Molecular modeling: basic principles and applications. New York. Cambridge­Tokyo. 1996, 200p.  7. Doucet, Jean­Pierre; Weber, Jacques. Computer­Aided Molecular design:  Theory and applications. New York. Academic Press. 1996, 511p.  8. Larson, Richard S. Bioinformatics and drug Discovery. New Jersey. Humana Press. 2006, 455p.  9. Cramer, Christopher J. Essentials of computational chemistry: theory and models. England. John Wiley & Sons Ltd. 2004, 607p.  Periódicos:  Bioorganic & Medicinal Chemistry  Journal of Molecular Graphics and Modelling  Journal of the American Chemical Society  Journal of the Brazilian Chemical Society  International Journal of Quantum Chemistry Bioinformatics  Journal of Computer­Aided Molecular Design  Computational and Theoretical Chemistry | |
|  | | |