



Universidade Regional do Cariri - URCA
Centro de Ciências Biológicas e da Saúde - CCBS
Departamento de Química Biológica – DQB



Programa de Pós-Graduação em Química Biológica - PPQB

DISCIPLINA: QUÍMICA COMPUTACIONAL (ELETIVA M/D)

CÓDIGO:

CRÉDITOS: 04

CARGA HORÁRIA: 60 H/A

DOCENTE RESPONSÁVEL: DINIZ MACIEL DE SENA JÚNIOR

I – EMENTA

O objetivo desta disciplina é familiarizar o pós-graduando com os métodos e ferramentas de análise e descrição de sistemas biomoleculares (estrutura e interações) capacitando-os para trabalhar com os principais softwares da área usados nos Institutos de Pesquisa e em indústria farmacêutica com desenvolvimento de fármacos. Ênfase será dada no estudo de Estrutura de proteínas e bancos de dados relacionados; Modelos homólogos; Docagem molecular (identificação de poses de ligação); Simulações de dinâmica molecular (evolução do sistema; modelos de solvente; análise de resultados); Estudo de caso: receptores acoplados à proteína-G.

II – PROCEDIMENTOS DE ENSINO

Técnicas Educacionais

Aula expositiva; elaboração de projetos e artigos; aulas práticas em laboratório.

Recursos Didáticos data show, quadro branco, aulas práticas.

III – AVALIAÇÃO

Projetos e artigos a serem elaborados durante a disciplina.

VII – BIBLIOGRAFIA

Understanding Molecular Simulation, 2nd Ed.: From Algorithms to Applications Frenkel, Daan, Smit, Berend, Academic Press (2001) ISBN: 0122673514
The Art of Molecular Dynamics Simulation, 2nd Ed., Rapaport, Dennis, Cambridge (2004) ISBN: 0521825687
Molecular Modelling: principles and applications, 2nd Ed., Leach, Andrew R., Addison-



Universidade Regional do Cariri - URCA
Centro de Ciências Biológicas e da Saúde - CCBS
Departamento de Química Biológica – DQB



Programa de Pós-Graduação em Química Biológica - PPQB

Wesley

(2001) ISBN: 0582382106

Bioinformática: da Biologia à Flexibilidade Molecular, Editor: Hugo Verli, Porto Alegre
(2014)

Disponível em <http://www.ufrgs.br/bioinfo/ebook/>