MINISTÉRIO DA EDUCAÇÃO
UNIVERSIDADE FEDERAL DO VALE DO SÃO FRANCISCO
PRÓ-REITORIA DE ENSINO - Proen
Av. José de Sá Maniçoba, s/nº. Centro - Caixa Postal 252 – 56304-205 - Petrolina-PE
Telefone: (87) 2101-6758. E-mail: proen@univasf.edu.br

UNIVERSIDADE FEDERAL DO VALE DO SÃO FRANCISCO
PROGRAMA DE DISCIPLINA

NOME	COLEGIADO	CÓDIGO	SEMESTRE
Modelagem Molecular Aplicados aos Produtos Naturais e Derivados	PGRNSA	QUIM0058	2018.1

CARGA HORÁRIA	TEÓR: 45	PRÁT: 00	HORÁRIOS: Segunda de 14:00 às 17:00 horas

CURSOS ATENDIDOS	SUB-TURMAS
Pós-Graduação em Recursos Naturais do Semi-Árido	
PROFESSOR (ES) RESPONSÁVEL (EIS)	**TITULAÇÃO**
Edilson Beserra de Alencar Filho	DOUTOR

EMENTA

Química Medicinal Computacional: Contexto da Química Medicinal, modo de ação dos fármacos, estrutura, propriedades físico-químicas, relação com os produtos naturais. Métodos computacionais clássicos e quânticos, construção e otimização de geometria de estruturas moleculares. Atracamento molecular ("molecular docking"): noções sobre algoritmos de busca e função "score", bancos de dados de macromoléculas e ligantes, aplicações aos produtos naturais. Estudos da RelaçãoEstrutura-Atividade Quantitativa ("QSAR"): Histórico, requisitos da análise QSAR, métodos usuais de análise multivariada, calibração, seleção de variáveis, abordagem dependente e independente do receptor, tipos e classificações usuais das modelagens QSAR, aplicação ao contexto dos produtos naturais. Estudos de artigos atuais, discussões e seminários.

OBJETIVOS

Despertar no estudante o interesse para a aplicação de metodologias computacionais no estudo de moléculas de origem natural com interesse biológico, focando aspectos de geometria, propriedades, descritores moleculares e a simulação de seu comportamento com diferentes abordagens teóricas.

METODOLOGIA (recursos, materiais e procedimentos)

Aulas expositivas com data-show e quadro; Uso do laboratório de informática da UNIVASF. Discussões e apresentação de seminários.

FORMAS DE AVALIAÇÃO

Apresentação de semiários com temas relevantes e atuais referentes aos tópicos abordados

CONTEÚDOS DIDÁTICOS

DATA (Dia/Mês)	TEMAS ABORDADOS/ ATIVIDADES DESENVOLVIDAS	PROFESSOR (ES)	CARGA/HORARIA	
			TEÓR	PRÁT.
	Química Medicinal Computacional: Contexto da Química Medicinal, modo de ação dos fármacos, estrutura, propriedades físico-químicas, relação com os produtos naturais.	Edilson Beserra	03	00
	Métodos computacionais clássicos e quânticos, construção e otimização de geometria de estruturas moleculares, obtenção de propriedades físico-químicas.	Edilson Beserra	03	00
	Discussão de artigos contextualizando modelagem molecular aplicada aos produtos naturais.	Edilson Beserra	03	00
	Uso de programas em Química Computacional aplicada ao estudo de moléculas de fontes naturais. (laboratório de informática)	Edilson Beserra	03	00
	Atracamento molecular ("molecular docking"): noções sobre algoritmos de busca e função "score", bancos de dados de macromoléculas e ligantes, aplicações aos produtos naturais.	Edilson Beserra	03	00

	Discussão de artigos sobre"docking"	Edilson Beserra	03	00
	Uso de programas em Química Computacional aplicada ao estudo de moléculas de fontes naturais. (laboratório de informática)	Edilson Beserra	03	00
	Estudos da Relação Estrutura-Atividade Quantitativa ("QSAR"): Histórico, requisitos da análise QSAR, métodos usuais de análise multivariada, calibração, seleção de variáveis, abordagem dependente e independente do receptor, tipos e classificações usuais das modelagens QSAR, aplicação ao contexto dos produtos naturais.	Edilson Beserra	03	00
	Discussão de artigos sobre a abordagem QSAR;	Edilson Beserra	03	00
	Uso de programas em Química Computacional aplicada ao estudo de moléculas de fontes naturais. (laboratório de informática)	Edilson Beserra	03	00
	Leitura de artigos e confecção de seminários	Edilson Beserra	03	00
	Leitura de artigos e confecção de seminários	Edilson Beserra	03	00
	Apresentação de Seminários	Edilson Beserra	03	00
	Apresentação de Seminários	Edilson Beserra	03	00
	Apresentação de Seminários	Edilson Beserra	03	00

REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

____/____/_____ _____ ____/____/_____ _____
DATA ASSINATURA DO PROFESSOR APROV. NO COLEGIADO COORD. DO COLEGIADO