

Modelação Molecular no Desenho de Fármacos

2018/2019

Docente

- **Paulo Martel**

Gabinete: FCT, Edifício C8, 3.12

Email: pmartel@ualg.pt

Homepage: <http://w3.ualg.pt/~pmartel>

Funcionamento da Cadeira

- Aulas teóricas
- Aulas práticas (computador)
- Frequencia
- Exame Final

(avaliações feitas on-line)

Página da disciplina:

<http://w3.ualg.pt/~pmartel/cadeiras/mmdf>

Programa

1. *Introdução ao Desenho de Fármacos: princípios gerais, história.*
2. *Computadores e Desenho Racional de Fármacos: papel da computação nos vários passos do desenho de fármacos. Desenho racional versus abordagem empírica. Modelação Molecular, Cheminformática, Bioinformática e Biologia Estrutural. Abordagens integrativas e modelação de sistemas.*
3. *Ferramentas Bioinformáticas no Desenho de Fármacos: formatos de representação, bases de dados, ferramentas de análises, bibliotecas de compostos.*
4. *Conceitos de Modelação Molecular: modelos moleculares, química quântica, campos de forças, minimização de energia, pesquisa conformacional, dinâmica molecular.*
5. *Desenho de fármacos baseado em estrutura: estrutura de proteínas, reconhecimento molecular, interações proteína-ligando, docking e screening virtual.*
6. *Desenho de fármacos baseado em ligandos: similaridade molecular, farmacóforos, 3D QSAR.*
7. *Previsão Computacional de Propriedades ADMET: cheminformática, descritores moleculares, drug-likeness, machine learning.*
8. *Casos de Estudo na Aplicação de técnicas computacionais ao desenho de fármacos.*

Bibliografia

Livros

- Klebe, G. *Drug Design: Methodology, Concepts, and Mode of Action*, Springer, 2013
- Krogsgaard-Larsen, P. ; Strømgaard, K. *Textbook of Drug Design and Discovery (5th ed.)*, CRC Press, 2016
- Merz, K.M; Ringe, D.; Reynolds, C.H. (eds.) *Drug Design: Structure and Ligand-Based Approaches*, Cambridge University Press, 2010
- Cavasotto, C.N. (ed.) *In Silico Drug Discovery and Design: Theory, Methods, Challenges and Applications*, CRC Press, 2016
- Mavromoustakos, M. (ed.) *Rational Drug Design* (Methods in Molecular Biology, v. 1824), 2018
- Koca et al (ed.) *Structural Bioinformatics Tools for Drug Design*, Springer, 2016
- Brown, N. *In Silico Medicinal Chemistry. Computational Methods to Support Drug Design*. RSC Theoretical and Computational Chemistry Series, Royal Society of Chemistry, 2016
- Leach, A.R. *Molecular Modelling: Principles and Applications (2nd Ed.)*, Pearson, 2001
- Wermuth, C. (ed) *The Practice of Medicinal Chemistry (3rd ed.)*, Academic Press, 2008
- Bartfai, T.; Lees, G. *Drug Discovery: From Bedside to Wall Street*, Elsevier Academic Press, 2006

Bibliografia

Revistas

Drug Discovery Today

Nature Reviews in Drug Discovery

Current Opinion in Drug Discovery and Development

Current Medicinal Chemistry

Current Drug Targets

Progress in Drug Research

Journal of Medicinal Chemistry

Journal of Computer-Aided Molecular Design

Journal of Molecular Graphics and Modelling

Current Opinion in Structural Biology

Current Opinion in Chemical Biology

Molecular Pharmacology

Letters in Drug Design and Discovery

European Journal of Pharmacology

European Journal of Medicinal Chemistry

Journal of Molecular Modelling

Journal of Computational Chemistry

Nature

Science

Proteins: Structure, Function and Genetics

Protein Science

Proceedings of the National Academy of Sciences

Journal of the American Chemical Society

Journal of Molecular Biology

Methods in Enzymology

Biophysical Journal

Biochemistry

Journal of Chemical Theory and Computation

Cheminformatics

Nucleic Acid Research

Bioinformatics

Bibliografia

WWW

Click2Drug

PubChem

ChemBL

Drug Bank

ZINC

Protein Data Bank

BindDB

PDBind

Entrez

Wikipedia

Google

Software

PyMOL

Autodock

Vina

Dock

Avogadro

Argus Lab

Gamess

Hyperchem

Gromacs