

UNIVERSIDADE ESTADUAL DO SUDOESTE DA BAHIA – UESB

Recredenciada pelo Decreto Estadual Nº 16.825, de 04.07.2016

DEPARTAMENTO DE CIÊNCIA E TECNOLOGIA – DCT

PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM QUÍMICA – PGQUI

PGSQUIJ027 - Ferramentas *in silico* para Identificação de Alvos e Moléculas com potencial Biológico (60h, 04Cr)

Ementa:

Entender os princípios básicos da Bioinformática e da Química Computacional aplicados ao estudo de alvos proteicos de interesse no combate de doenças humanas e animais, além de alvos ligados à pragas agrícolas, aliado ao estudo computacional de compostos bioativos naturais e sintéticos utilizando métodos clássicos de triagem virtual de moléculas, dinâmica molecular e inteligência artificial (IA).

Bibliografia:

- 1) Hazelrigg, Stuart L. e Watson, Richard A. Bioinformática: uma abordagem introdutória. 2. ed. Porto Alegre: Artmed, 2012.
- 2) Waterman, Michael R. Bioinformática: princípios e aplicações. 3. ed. São Paulo: Pearson, 2014.
- 3) Torney, David C. Bioinformática: uma abordagem prática. 2. ed. São Paulo: Pearson, 2016.
- 4) Lipman, David J., Altschul, Bruce R. e Wootton, James C. Introdução à Biologia Computacional. 2. ed. Porto Alegre: Artmed, 2010.
- 5) Waterman, Michael S., Waterman, Michael R. e Lipman, David J. Bioinformática: fundamentos e aplicações. 2. ed. São Paulo: Pearson, 2013.
- 6) Torney, David C. e Skolnick, Jeffrey. Bioinformática: uma abordagem prática. 3. ed. São Paulo: Pearson, 2018.
- 7) Sousa, José Antonio de, e Silva, Francisco Ivan da. Explorando a química computacional. 2. ed. São Paulo: Pearson, 2017.
- 8) Sá, Ézio Raul Alves de, Sousa, José Antonio de, e Silva, Francisco Ivan da. Ferramentas de investigação em química computacional e bioinformática. 2. ed. São Paulo: Pearson, 2019.
- 9) Cramer, Christopher J. Essentials of computational chemistry: theories and models. 2. ed. Hoboken, NJ: Wiley, 2013.
- 10) Barreiro, Eliezer J., e Fraga, Carlos Alberto Manssur. Química medicinal: as bases moleculares da ação dos fármacos. 4. ed. São Paulo: Manole, 2023.
- 11) Lemke, Thomas L., Williams, David A., e Zito, William. Foye's principles of medicinal chemistry. 9. ed. Philadelphia, PA: Wolters Kluwer, 2022.
- 12) Alder, Kenneth S., e Noble, Robert L. Principles of medicinal chemistry. 5. ed. New York: McGraw-Hill, 2022.