

PLANO DE ENSINO
2026-1

I. IDENTIFICAÇÃO

Programa: Pós-Graduação em Química

Disciplina: Tópicos especiais 2: Introdução à Modelagem Molecular

Código da disciplina: QUIJ0707

Carga horária: 32 horas

Professor(a): Breno Almeida Soares

II. EMENTA

Conceitos e terminologias fundamentais de modelagem molecular aplicados à química medicinal. Relação entre moléculas bioativas e alvos biológicos. Introdução aos principais métodos de modelagem molecular, incluindo abordagens baseadas em mecânica molecular e métodos quânticos. Abordagem fisiológica no planejamento de substâncias bioativas e etapas do planejamento racional de fármacos. Estrutura, organização e utilização do Protein Data Bank (PDB). Fundamentos teóricos da docagem molecular e aplicações práticas utilizando o programa GOLD. Ferramentas computacionais para visualização, construção e preparação de estruturas tridimensionais de ligantes e alvos biológicos, incluindo os programas MarvinSketch, PyMOL e BIOVIA Discovery Studio Visualizer, além de servidores *on line*. Aplicações da modelagem molecular no estudo de receptores de serotonina complexados com agonistas e antagonistas. Análise de estudos de caso e artigos científicos envolvendo abordagens *in silico* no planejamento de substâncias bioativas.

III. OBJETIVOS

Compreender e aplicar os conceitos fundamentais da modelagem molecular no estudo da interação entre moléculas bioativas e alvos biológicos, bem como em estratégias de planejamento de fármacos.

Objetivos Específicos:

- Apresentar os principais conceitos, terminologias e abordagens utilizadas em modelagem molecular aplicada à química medicinal.
- Compreender a relação entre estrutura molecular, propriedades físico-químicas e atividade biológica, com ênfase na interação entre ligantes e alvos biológicos.
- Diferenciar as principais abordagens computacionais empregadas em modelagem molecular, incluindo métodos clássicos baseados em mecânica molecular e métodos de química quântica.
- Explorar bases de dados estruturais, em especial o Protein Data Bank (PDB), para obtenção e análise de estruturas tridimensionais de macromoléculas biológicas.

- Utilizar ferramentas computacionais para construção, visualização e preparação de estruturas tridimensionais de ligantes e alvos biológicos (MarvinSketch, PyMOL e BIOVIA Discovery Studio Visualizer).
- Aplicar fundamentos de docagem molecular na investigação de interações entre ligantes e receptores, com utilização do programa GOLD.
- Analisar criticamente artigos científicos que empregam abordagens *in silico* no planejamento de substâncias bioativas.

IV. CONTEÚDO E CRONOGRAMA

Encontro 1: 20/03/2026 – sexta-feira – horário: 09:15 – 10:45 h

Apresentação da disciplina. Introdução à modelagem molecular e suas aplicações na química medicinal. Principais conceitos e terminologias.

Encontro 2: 27/03/2026 – sexta-feira – horário: 09:15 – 10:45 h

Relação entre estrutura molecular, propriedades físico-químicas e atividade biológica. Interações intermoleculares relevantes na ligação ligante-receptor.

Encontro 3: 03/04/2026 – sexta-feira – horário: 09:15 – 10:45 h

Relação entre moléculas bioativas e alvos biológicos. Tipos de alvos farmacológicos (receptores, enzimas, transportadores).

Encontro 4: 11/04/2026 – sexta-feira – horário: 09:15 – 10:45 h

Introdução aos métodos de modelagem molecular. Diferenças entre métodos clássicos e métodos quânticos.

Encontro 5: 18/04/2026 – sexta-feira – horário: 09:15 – 10:45 h

Fundamentos de mecânica molecular: campos de força, energia potencial e otimização geométrica.

Encontro 6: 25/04/2026 – sexta-feira – horário: 09:15 – 10:45 h

Introdução aos métodos de química quântica aplicados à modelagem molecular.

Encontro 7: 01/05/2026 – sexta-feira – horário: 09:15 – 10:45 h

Planejamento racional de fármacos: estratégias *LDBB* e *SBDD*. Abordagem fisiológica no planejamento de substâncias bioativas.

Encontro 8: 08/05/2026 – sexta-feira – horário: 09:15 – 10:45 h

Etapas do planejamento de fármacos e integração de métodos computacionais no desenvolvimento de moléculas bioativas.

Encontro 9: 15/05/2026 – sexta-feira – horário: 09:15 – 10:45 h

Estrutura, organização e exploração do Protein Data Bank (PDB). Busca, seleção e análise de estruturas de proteínas. Ferramentas computacionais para construção e otimização de ligantes: utilização do MarvinSketch, MOPAC e BIOVIA Discovery Studio Visualizer.

Encontro 10: 22/05/2026 – sexta-feira – horário: 09:15 – 10:45 h

Visualização e análise de estruturas tridimensionais de proteínas utilizando PyMOL e BIOVIA Discovery Studio Visualizer. Preparação de ligantes e alvos biológicos para estudos de docagem molecular.

Encontro 11: 29/05/2026 – sexta-feira – horário: 09:15 – 10:45 h

Fundamentos da docagem molecular: conceitos, funções de pontuação (*scoring functions*), busca conformacional.

Encontro 12: 05/06/2026 – sexta-feira – horário: 09:15 – 10:45 h

Docagem molecular utilizando o GOLD: configurações básicas e interpretação de resultados.

Encontro 13: 12/06/2026 – sexta-feira – horário: 09:15 – 10:45 h

Aplicações da modelagem molecular no estudo de receptores de serotonina complexados com agonistas e antagonistas. Discussão de artigos na área.

Encontro 14: 19/06/2026 – sexta-feira – horário: 09:15 – 10:45 h

Aplicações da modelagem molecular no estudo de receptores de serotonina complexados com agonistas e antagonistas. Discussão de artigos na área.

Encontro 15: 26/06/2026 – sexta-feira – horário: 09:15 – 10:45 h

Aplicações da modelagem molecular no estudo de receptores de serotonina complexados com agonistas e antagonistas. Discussão de artigos na área.

Encontro 16: 03/06/2026 – sexta-feira – horário: 09:15 – 10:45 h

Apresentação de um mini-projeto que valerá como avaliação.

V. Metodologia

A disciplina será conduzida por meio de aulas expositivas dialogadas, com o auxílio de recursos audiovisuais, buscando promover a participação ativa dos discentes e estimular o desenvolvimento do pensamento crítico. Serão também incentivadas atividades de leitura e interpretação da literatura científica, bem como momentos de debate e reflexão coletiva sobre os temas abordados em aula. Como recursos didáticos, poderão ser utilizados quadro negro, apresentações em slides, materiais de divulgação científica, vídeos, podcasts e outros conteúdos multimídia pertinentes.

VI. Critérios de Avaliação

A nota de avaliação desta disciplina será obtida por meio da apresentação de um miniprojeto no qual cada discente deverá abordar uma problemática e apresentar resultados de simulações de docagem no(s) alvo(s) terapêutico(s) relacionado(s) com a problemática apresentada.

OBS: A frequência mínima exigida é de 75%. Será considerado aprovado o discente que obtiver conceito APTO (conceito A, B ou C), de acordo com o Regulamento do PPGQ.

A relação entre conceito e nota, nesta disciplina, é expressa da seguinte forma:

Conceito	Significado	Notas
A	Excelente, aprovado, com direito ao crédito.	10,0 – 9,0
B	Bom, aprovado, com direito ao crédito.	8,9 – 7,5
C	Regular, aprovado, com direito ao crédito.	7,4 – 6,0
D	Insuficiente, reprovado, sem direito ao crédito.	≤5,9

VII. Bibliografia

Básica:

- MORGON, N. H.; COUTINHO, K. **Métodos de Química Teórica e Modelagem Molecular**. 1ª ed. Livraria da Física.
- ANDREI, C.C. et al. (Org.); **Da química medicinal à química combinatória e modelagem molecular: um curso prático**, Manole, São Paulo, 2003.
- BARREIRO, E.J., FRAGA, C.A.M.; **Química medicinal: as bases moleculares da ação dos fármacos**, 3ª Ed, ArtMed, Porto Alegre, 2015.
- THOMAS, G.; **Química medicinal: uma introdução**, Guanabara Cougan, Rio de Janeiro, 2003.

VERLI, H. **Bioinformática: da biologia à flexibilidade molecular**. Sociedade Brasileira de Bioquímica e Biologia Molecular, 2014. Creative Commons License (e-book: <https://lume.ufrgs.br/bitstream/handle/10183/166105/001012172.pdf?sequence=1&isAllowed=y>)

Complementar:

- KOROLKOVAS, A., BURCKHALTER, J.H.; **Química farmacêutica**, Guanabara Cougan, Rio de Janeiro, 1988. SOLOMONS, T. W. G.; Fryhle, C. B. **Química Orgânica**, 12ª Ed, Vol. I e II, LTC, 2018.
- HINCHLIFFE, A. **Molecular Modelling for Beginners**. 2nd Edition. John Willey&Sons. 2008.
- Artigos científicos de revistas indexadas da área de Modelagem Molecular aplicada a Química Medicinal.

Data	Jataí, 13 de março de 2026
-------------	----------------------------

Prof. Dr. Breno Almeida Soares
Docente da disciplina