

Campus: São José dos Campos		
Curso (s): Bacharelado em Biotecnologia e Bacharelado em Ciência e Tecnologia		
Unidade Curricular (UC): Modelagem Molecular		
Unidade Curricular (UC): [nome da UC em inglês - obrigatório] <i>Molecular Modeling</i>		
Código da UC: 5861		
Termo: 7º		Turno:
UC: () Fixa (X) Eletiva () Optativa	Oferecida como: (X) Disciplina () Módulo () Estágio () Outro:	Oferta da UC: (X) Semestral () Anual
Pré-Requisito (s) - Indicar Código e Nome (s) da (s) UC: 5853 Biologia Estrutural		
Carga horária total (em horas): 72h		
Carga horária teórica (em horas): 36h	Carga horária Prática (em horas): 36h	Carga horária de extensão (em horas, se houver): 0h
<p>Ementa: Métodos de bioinformática estrutural. Modelagem molecular. Mecânica Molecular. Dinâmica molecular. Cálculos energéticos. Desenho racional de fármacos.</p>		
<p>Bibliografia:</p> <p>Básica:</p> <ol style="list-style-type: none"> 1. LEACH, A.R. <i>Molecular Modelling, Principles and Applications</i>. 2nd Ed. Prentice Hall 2001. 2. SCHLICK, T. <i>Molecular Modeling and Simulation</i>. Springer 2002. 3. CRAMER, C.J. <i>Computational Chemistry</i>. Wiley 2002. <p>Complementar:</p> <ol style="list-style-type: none"> 1. TINOCO, Ignacio; SAUER, Kenneth; WANG, James C.; PUGLISI, Joseph D. <i>Physical chemistry: principles and applications in biological sciences</i>. 4 ed. Upper Saddle, NJ: Prentice Hall, 2003. 2. BRANDEN, C.; TOOZE, J. <i>Introduction to Protein Structure</i>, 2nd Ed., Garland, 1999. 3. MILLER, TANNER. <i>Essentials of Chemical Biology. Structure and Dynamics of Biological Macromolecules</i>. Wiley 2013. 4. KINSER, Jason. <i>Python for bioinformatics</i>. Sudbury, Massachusetts: Jones and Bartlett Publishers, 2009. 5. MCQUARRIE, Donald A. <i>Quantum chemistry</i>. 2 ed. Sausalito, California: University Science Books, 2007. 		