



UNIVERSIDADE FEDERAL DO PARÁ
INSTITUTO DE CIÊNCIAS EXATAS E NATURAIS
PROGRAMA DE PÓS – GRADUAÇÃO EM QUÍMICA



SÚMULA DA DISCIPLINA DO PPGQ/UFPA

DISCIPLINA: **MODELAGEM COMPUTACIONAL DE REAÇÕES ENZIMÁTICAS** (disciplina eletiva)

a) **Código da disciplina:** PPGQI0116

b) **Carga Horária:** 60h

c) **Créditos:** 4

d) **Ementa:** Introdução à Catálise Enzimática. Representação Química de Modelos Moleculares. Fundamentos de Mecânica Molecular (MM) e Mecânica Quântica (MQ). Algoritmos de Otimização e Dinâmica Molecular. Potenciais Híbridos de MM e MQ. Superfície de Energia Potencial. Potencial de Força Média. Energia Livre de Ativação e Reacional. Mecanismo Enzimático e o Desenho de Fármacos.

e) **Bibliografia**

I - Básica

- 1) CRAMER, C. J. **Essentials of computational chemistry: theories and models**. John Wiley & Sons Ltd, 2nd ed. 2004.
- 2) FIELD, M. J. **A Practical Introduction to the Simulation of Molecular Systems**. Cambridge University Press, 2nd ed. 2007.
- 3) COPELAND, R. A. **Enzymes: A Practical Introduction to Structure, Mechanism and Data Analysis**. Wiley & Sons Ltd, 2nd ed. 2000.
- 4) LIPKOWITZ, K.; PARRILL, A. L. **Reviews in computational chemistry**. Wiley & Sons Ltd, 2019.

II - Complementar

- 1) LEVINE, I. N. **Quantum Chemistry**. 7th Edition, Pearson Education: 2013.
- 2) MORGON, N. H.; COUTINHO, K. R. **Métodos de química teórica e modelagem molecular**. Editora Livraria da Física, São Paulo, 2007.

Programa de Pós – Graduação em Química (PPGQ-ICEN/UFPA)

Endereço: Rua Augusto Corrêa, 01 – Campus Universitário Básico do Guamá
Belém - Pará – Brasil – CEP: 66.075 - 110

- 3) FERSHT, A. R. **Structure and Mechanism in Protein Science. A Guide to Enzyme Catalysis and Protein Folding.** New York, 1999.