

**Nelilma Romeiro**

**UFRJ-Macaé**

### **Molecular Modelling Strategies for the Discovery of Bioactive Natural Products**

The mini-course aims at covering a few molecular modelling strategies reported in the literature applied to the discovery and development of bioactive Natural Products (NPs). In this context, examples will be given, including the design of analogues and derivatives; target fishing of NP molecular libraries and Virtual Screening and Molecular Dynamics studies for the analysis of putative binding modes of NPs with therapeutic targets.

### **Estratégias de Modelagem Molecular para a Descoberta de Produtos Naturais Bioativos**

O mini-curso visa cobrir algumas estratégias de modelagem molecular relatadas na literatura, aplicadas à descoberta e desenvolvimento de Produtos Naturais (PNs) bioativos. Neste contexto, exemplos serão dados, incluindo o planejamento de análogos e derivados; *Target Fishing* de bibliotecas moleculares de NPs e Estudos de Triagem Virtual e Dinâmica Molecular para a análise de modos de ligação teóricos de PNs e alvos terapêuticos.