



## FICHA DE CADASTRO DOS LABORATORIO DE PESQUISA DE UFG

NOME DO LABORATÓRIO

Laboratório de Planejamento de Fármacos e Modelagem Molecular (LabMol)

DOCENTES RESPONSÁVEIS

Dra. Carolina Horta Andrade

TÉCNICOS DO LABORATÓRIO

Não possui

REGIONAL

Goiânia

UNIDADE ACADÊMICA / UNIDADE ACADÊMICA ESPECIAL

Faculdade de Farmácia

DEPARTAMENTO

MULTIUSUÁRIO

Sim

Não

LOCALIZAÇÃO

Faculdade de Farmácia da UFG Rua 240, esquina com 5a avenida s/n, Setor Leste  
Universitário, 1º. pavimento, CEP: 74605-170, Goiânia/Goiás - Brasil.  
Campus Colemar Natal e Silva.  
Telefone (62) 3209-6451

WEBSITE

<http://farmacia.ufg.br/labmol>



#### MISSÃO/OBJETIVO DO LABORATÓRIO

O LabMol tem como missão desenvolver e aplicar estratégias computacionais e experimentais em Química Medicinal para a identificação de novas moléculas bioativas contra doenças tropicais negligenciadas e câncer, além de desenvolver modelos e plataformas para o estudo de propriedades farmacocinéticas e toxicidade de compostos químicos.

Linhas de pesquisa:

- Planejamento racional de quimioterápicos potencialmente ativos contra doenças negligenciadas e câncer
- Desenvolvimento de Modelos *In Silico* para o estudo de Propriedades Farmacocinéticas e Toxicidade

#### TÉCNICAS ROTINEIRAMENTE EXECUTADAS NO LABORATÓRIO

Técnicas computacionais do planejamento de fármacos auxiliado por computador (CADD):

- Desenvolvimento e validação de modelos de QSAR; Docking; geração e validação de Modelos farmacofóricos; Triagem Virtual; *Data mining*; Preparo de dados, desenho de estruturas moleculares, análises de duplicadas

#### RELAÇÃO DOS EQUIPAMENTOS

- 1 servidor Dell PowerEdge R730 rack com 48 processadores CPU (2 Intel Xeon at 2.5GHz) e GPU, 256 GB of RAM, totalizando 92 CPU cores e 3,072 CUDA cores.
- 10 estações computacionais em rede (Cluster) com sistema operacional CentOS 5.5 GNU/Linux, totalizando em 44 processadores em rede de alta performance.
- 10 computadores Intel® Xeon® paralelizados utilizando o Open MPI (Open Source High Performance Computing).
- Licença de uso dos pacotes computacionais: Maestro v. 9.1.207 (Schrödinger, Inc.); SYBYL-X v. 1.2 (Certara, Inc.) PyMOL v. 1.3 (Schrödinger, Inc.); ECCE v. 6.0 (USA Department of Energy), UCSF Chimera, v.1.5 (UCSF); todos os pacotes computacionais do OpenEye Scientific Software, Inc., QSAR: Wolf 3.0, 4D-QSAR 3.0 (The Chem21 Group, Inc.), entre vários outros.
- Balança analítica (1)
- Ultrafreezer – 80 °C (1)
- Leitor de microplacas multi-função (1)