

unioeste

Universidade Estadual do Oeste do Paraná
Campus de Toledo

Rua da Faculdade, 645 - Jd. Santa Maria - Fone: (45) 3379-7060 - CEP 85903-000 - Toledo - PR

Email: toledo.mestradoquimica@unioeste.br



PARANÁ

GOVERNO DO ESTADO

Anexo II – Resolução nº 133/2003-CEPE

UNIVERSIDADE ESTADUAL DO OESTE DO PARANÁ PRÓ-REITORIA DE PESQUISA E PÓS-GRADUAÇÃO

PLANO DE ENSINO - PERÍODO LETIVO/ANO 2º/2021

Programa: Programa de Pós-Graduação em Química - PPGQUI

Área de Concentração: Química

Mestrado em Química

Centro das Engenharias e Ciências Exatas - CECE

Campus de Toledo

DISCIPLINA

Código	Nome	Carga horária		
		AT ¹	AP ²	Total
	Tópicos Especiais em Química I: ESTUDOS DE RELAÇÃO ESTRUTURA-ATIVIDADE QUANTITATIVA (QSAR)	30		30

¹ Aula Teórica; ² Aula Prática)

Ementa

Noções e conceitos importantes sobre QSAR teórico e prático, suas aplicações, principais abordagens utilizadas, e programas que permitam realizar estudos na área, com foco em programas gratuitos.

Objetivos

Apresentar os conceitos e métodos básicos para realização de estudos de relação estrutura-atividade quantitativa (QSAR), incluindo sugestões de programas gratuitos que podem ser utilizados para realização tanto de estudos focados em aprendizado quanto em pesquisas propriamente dita.

Conteúdo Programático

1. **Introdução: histórico, conceitos e aplicações.**
2. **Descritores moleculares: o que são?**
3. **Apresentação geral das principais abordagens utilizadas – QSAR-2 a 6D.**
4. **Validação de modelos QSAR.**
5. **Interpretação de modelos QSAR.**

Atividades Práticas

Algumas atividades serão realizadas no decorrer dos conteúdos, focando em apresentar alguns programas gratuitos para os pós-graduandos. Estas atividades serão realizadas principalmente de modo expositivo, porém poderão ser entregues exercícios para os discentes testarem os programas, já que o foco será o uso de programas gratuitos.

Metodologia

Devido à pandemia do COVID-19 e considerando a Resolução nº 052/2020 – CEPE, a metodologia adotada excepcionalmente abrangerá o envio de materiais de apoio. Aulas remotas síncronas realizadas por meio de aplicativos como *ZOOM*, *Google Meet* ou *Microsoft Teams* serão realizadas para discussão dos temas. Tarefas sobre os temas serão solicitadas, avaliadas e o docente dará *feedback* aos discentes. Recursos como textos e temas de caráter científico em artigos científicos serão utilizados. Caso as aulas voltem a ser presenciais, serão utilizadas aulas expositivas incentivando a participação e valorizando os conhecimentos prévios dos acadêmicos.

Avaliação

(critérios, mecanismos, instrumentos e periodicidade)

A avaliação será feita através de um seminário onde os alunos deverão apresentar os resultados de um estudo QSAR que cada um irá desenvolver separadamente. O seminário terá nota entre 0 e 100.

Bibliografia básica

Kunal Roy, Supratik Kar, Rudra Narayan Das. *Understanding the Basics of QSAR for Applications in Pharmaceutical Sciences and Risk Assessment*. Academic Press: 1ª edição. 2015.

João Paulo Ataíde Martins. *Química Computacional Aplicada a QSAR*. Apostila. CENAPD-SP. 2010.

Roberto Todeschini, Viviana Consonni, Raimund Mannhold, Hugo Kubinyi, Gerd Folkers. *Molecular Descriptors for Chemoinformatics*. Volume I: Alphabetical Listing. 2ª Edição. 2009.

Bibliografia complementar

Artigos e separatas sobre o tema a serem enviados para os discentes.

Docentes

Prof. Dr. Eduardo Borges de Melo

Data 05 / 04 /2021

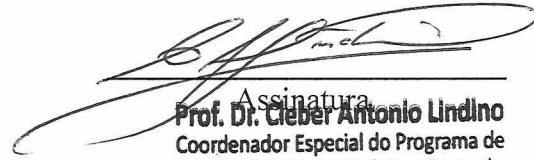


Assinatura do docente responsável pela disciplina

Colegiado do Programa (**aprovação**)

Ata n° 002 , de 05/04 /2021.

Coordenador: Cleber Antonio Lindino

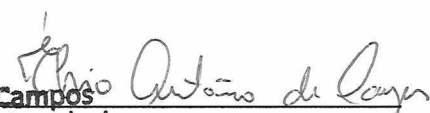


Assinatura
Prof. Dr. Cleber Antonio Lindino
 Coordenador Especial do Programa de
 Pós-Graduação Em Química Mestrado
 Portaria N° 0350/2021-GRE

Conselho de Centro (**homologação**)

Ata de n° 02 , de 12/04 /2021.

Diretor de Centro: Elvio Antonio de Campos



Assinatura
Elvio Antonio de Campos
 Diretor do Centro de Engenharias
 e Ciências Exatas
 Portaria n° 0027/2020-GRE
 Unioeste - Campus de Toledo

Encaminhada cópia à Secretaria Acadêmica em: / / .

Nome/assinatura