



**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/2023**

**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 <sup>1</sup>	AP <sup>2</sup>	Total
	<b>Tópicos Especiais em Química I: Estudos de Relação Estrutura-Atividade Quantitativa (QSAR)</b>	<b>30</b>		<b>30</b>

<sup>1</sup> Aula Teórica; <sup>2</sup> 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**

Aulas e atividades presenciais em sala de aula + atividades guiadas por apostila.

### **Avaliação**

(critérios, mecanismos, instrumentos e periodicidade)

A participação dos pós-graduandos será utilizada como critério de avaliação.

### **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 27 / 09 /2023

Assinatura do docente responsável pela disciplina

**Colegiado do Programa (aprovação)**

Ata nº 08 , de 10 / 11 /2023.

Coordenador: Cleber Antonio Lindino

Assinatura

**Prof. Dr. Cleber Antonio Lindino**  
Coordenador do Programa de  
Pós-Graduação em Química  
Portaria N° 0436/2023-GRE

**Conselho de Centro (homologação)**

Ata de nº 07 , de 17 / 11 /2023.

Diretor de Centro: Elvio Antonio de Campos

Assinatura  
**Elvio Antonio de Campos**  
Diretor do Centro de Engenharias  
e Ciências Exatas  
Portaria nº 0027/2023-RE  
Bocaiuva - Campus de Toledo

Encaminhada cópia à Secretaria Acadêmica em: / /

Nome/assinatura