



## **1. Disciplina**

**02108P – Modelagem QSPR/QSAR: Fundamentos e Aplicações**

**Professor Responsável: Joaquín A. M. Villarreyes**

**Nível: Doutorado**

**Carga horária: 45 horas**

**Créditos: 03**

**Caráter: Eletivo**

**Duração: Semestral**

**Área de concentração: Físico-Química**

**Lotação: Escola de Química e Alimentos da FURG.**

## **2. Ementa**

Fundamentos de modelagem molecular: Modelagem molecular dinâmica. Modelagem molecular estática (Standard Geometry); Desenvolvimento de modelos moleculares standard geometry. Homologia e princípio da congruência de Brönsted-Koefoed; Equações QSPR e QSAR: propriedades (físicas, químicas, etc) das substâncias. Atividade (biológica, ecotoxicológica, química medicinal, etc) das substâncias. Estrutura e propriedades das equações QSPR/QSAR. Funções monotônicas; Descritores e preditores moleculares: Obtenção de descritores geométricos, topológicos, quânticos e de conteúdo de informação; Fundamentos de estatística. Análise de regressão (linear, multilinear e não linear). Análise multivariada. Erro absoluto e relativo; Avaliação do desempenho de descritores na modelagem QSPR/QSAR. Comparação de dados calculados versus experimentais ou da literatura. Estrutura de bancos de dados de propriedades e atividades.

## **3. Bibliografia Básica**

1. S. ZHANG, X. LU, Q. ZHOU, X. LI, X. ZHANG, S. LI, Ionic liquids - Physicochemical Properties, Elsevier Science Ltd, 2009.

2. A. L. HORVATH, Molecular design: Chemical Structure Generation from the Properties of Pure Organic Compounds, Elsevier Science Ltd, 1992.

Página 11/62 - 28/07/2011 11:26:09

3. J. DEVILLERS, A. T. BALABAN, Topological Indices and Related Descriptors in QSAR and QSPR, Gordon and Breach, 1999.



**UNIVERSIDADE FEDERAL DO RIO GRANDE**  
**ESCOLA DE QUÍMICA E ALIMENTOS**  
**PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM QUÍMICA TECNOLÓGICA E AMBIENTAL**

---

4. B. E. POLING, J. M. PRAUSNITZ, J. O'CONNOR, The Properties of Gases and Liquids, McGraw-Hill Professional, 5TH Edition, 2000.
5. M. RANDIC, Discrete Mathematics Applied to QSAR and Beyond (QSAR in Environmental and Health Sciences), CRC, 2010.
6. A. T. BALABAN, From Chemical Topology to Three-Dimensional Geometry, Plenum Pub. Corp., 1997.
7. L. ACHENIE, V. VENKATASUBRAMANIAN, R. GANI, Computer Aided Molecular Design: Theory and Practice, Computers Aided Chem. Eng., Elsevier Science Ltd., 2002.
8. G. M. KONTOGEORGIS, R. GANI, Computer Aided Property Estimation for Process and Product Design, Computers Aided Chem. Eng., Vol. 19, Elsevier Science Ltd., 2004.