

Mini-Curso

APLICAÇÃO DA METODOLOGIA QSAR-4D USANDO O PROGRAMA LQTA-QSAR

4 a 6 de março de 2009

Aulas teóricas e práticas
Vagas limitadas

**Local: Instituto de Química, UNICAMP
Campinas, São Paulo**



Coordenação:

Profa. Tit. Márcia Miguel Castro Ferreira

**Grupo de Pesquisa do Laboratório
de Quimiometria Teórica e Aplicada – LQTA**
<http://lqta.iqm.unicamp.br>

Inscrições:

Dezembro 2008 a Janeiro 2009

Programa

**4 de março – aula teórica
manhã – 8:30 às 12:00**

**Introdução à Quimiometria Aplicada
ao QSAR**

Prof. Tit. Márcia Miguel Castro Ferreira- LQTA

**4 de março – aula prática
tarde – 14:00 às 17:30**

Construção de Modelos QSAR

Prof. Tit. Márcia Miguel Castro Ferreira- LQTA

**5 de março – aula teórica
manhã – 8:30 às 12:00**

**Introdução ao QSAR-4D
Programa LQTAgrid**

Dra. Kerly Fernanda Mesquita Pasqualoto- LQTA

**5 de março – aula prática
tarde – 14:00 às 17:30**

**Dinâmica Molecular - GROMACS
LQTAgrid – Descritores QSAR-4D**

Ms. Euzébio Guimarães Barbosa- LQTA

**6 de março – aulas teóricas
manhã – 8:30 às 12:00**

Método de Seleção de Variáveis

Ms. João Paulo Ataíde Martins - LQTA

**Construção e Validação de Modelos
QSAR - QSARmodelling**

Ms. João Paulo Ataíde Martins- LQTA

**6 de março – aulas práticas
tarde – 14:00 às 17:30**

**QSARmodelling – Construção
e Validação de Modelos QSAR-4D**

Ms. João Paulo Ataíde Martins - LQTA

Visualização dos descritores QSAR-4D

Ms. Euzébio Guimarães Barbosa- LQTA

**Além de Certificado, os participantes
receberão ao final do mini-curso
os programas do pacote gratuito
LQTA-QSAR.**