

UNIVERSIDADE DE SÃO PAULO
INSTITUTO DE QUÍMICA

ESTUDO DE PROPRIEDADES FÍSICO-QUÍMICAS E DE CRITÉRIOS
PARA OBTENÇÃO E VALIDAÇÃO DE MODELOS QSAR PARA
SÉRIES DE ANÁLOGOS DE SEMICARBAZONAS COM ATIVIDADE
ANTICHAGÁSICA, RETIRADAS DA LITERATURA

Marcus Tullius Scotti

Dissertação de Mestrado

ORIENTADORA: Antonia Tavares do Amaral

SÃO PAULO

Primeiro de Abril de dois mil e cinco

UNIVERSIDADE DE SÃO PAULO
INSTITUTO DE QUÍMICA

ESTUDO DE PROPRIEDADES FÍSICO-QUÍMICAS E DE CRITÉRIOS
PARA OBTENÇÃO E VALIDAÇÃO DE MODELOS QSAR PARA
SÉRIES DE ANÁLOGOS DE SEMICARBAZONAS COM ATIVIDADE
ANTICHAGÁSICA, RETIRADAS DA LITERATURA

Marcus Tullius Scotti

Dissertação de Mestrado

ORIENTADORA: Antonia Tavares do Amaral

SÃO PAULO

Primeiro de Abril de dois mil e cinco

EPÍGRAFE

“Gutta cavat lapidem non bis, sed saepe cadendo; sic homo fit sapiens bis non, sed saepe legendo”.

A gota fura a pedra caindo não duas, mas muitas vezes; assim o homem fica culto lendo não duas, mas muitas vezes.

Giordano Bruno

DEDICATÓRIA

Dedico este trabalho.

Aos meus pais, Tullio Scotti e Lélia de Medeiros Scotti pelo todo o apoio e companheirismo, principalmente nos momentos mais difíceis.

À minha irmã, Luciana Scotti, por ser a principal fonte de perseverança na minha vida.

AGRADECIMENTOS

À Professora Dra. Antonia Tavares do Amaral, do Instituto de Química da USP, pela orientação.

À Professora Dra. Elizabeth Igne Ferreira, da Faculdade de Ciências Farmacêuticas da USP, pela oportunidade e apoio.

Ao Professor Roy Bruns, do Instituto de Química da UNICAMP, pelas excelentes aulas ministradas e pela atenção.

Ao Professor Hugo Kubinyi, da Universidade de Heidelberg, Alemanha, por sua contribuição e ajuda científica nesta dissertação.

Aos Professores Paulo Roberto Hrihorowitsch Moreno e Daisy de Brito Rezende, do Instituto de Química da USP, pelas aulas, pela atenção fornecida e principalmente, pelas conversas agradáveis.

Principalmente aos meus colegas de laboratório, Leandro de Rezende, técnico em informática pelo projeto PROCONTES, PRP-USP e, Hamilton Mitsugo Ishiki, por suas contribuições nesta dissertação e pelo companheirismo.

Aos meus colegas de laboratório, Alberto Malvezzi, Maurício Vulcano, Annelies Kawanami, Elba Vieira Mustafa dos Santos, Inocência Ferreira da Silva e Enio Robson Braz pela ajuda científica e companheirismo.

À minha namorada Kátia Babesco por ter sempre me apoiado.

À CAPES pela bolsa de mestrado fornecida e, à FAPESP pelo auxílio financeiro fornecido ao projeto temático nº 01/01192-3.