

—

Químio-Informática

Luís Spencer Lima

João Aires de Sousa

CITAÇÃO

Lima, L. S. (2015)
Químio-Informática,
Rev. Ciência Elem., V3(02):130.
doi.org/10.24927/rce2015.130

EDITOR

José Ferreira Gomes,
Universidade do Porto

RECEBIDO EM

28 de janeiro de 2012

ACEITE EM

26 de março de 2012

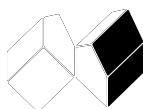
PUBLICADO EM

15 de junho de 2015

COPYRIGHT

© Casa das Ciências 2015.
Este artigo é de acesso livre,
distribuído sob licença Creative
Commons com a designação
[CC-BY-NC-SA 4.0](https://creativecommons.org/licenses/by-nc-sa/4.0/), que permite
a utilização e a partilha para fins
não comerciais, desde que citado
o autor e a fonte original do artigo.

rce.casadasciencias.org



A Químio-informática é uma área científica que utiliza metodologias informáticas para resolver problemas de Química normalmente associados à utilização de informação sobre estruturas moleculares. Tem grande impacto na indústria farmacêutica ao nível dos processos de descoberta de novos fármacos e tem um impacto crescente na área ambiental para a estimativa do risco associado aos produtos químicos existentes no mercado. Noutro exemplo de aplicação muito relevante, a Químio-informática é responsável pelas infraestruturas que permitem a criação, manutenção, acesso e exploração de grandes bases de dados envolvendo estruturas moleculares – um caso paradigmático é a PubChem.

Para além do processamento de grandes conjuntos de dados experimentais associados a estruturas moleculares, são aplicações típicas da Químio-informática a utilização de métodos estatísticos e de aprendizagem automática para a previsão de atividades biológicas ou outras propriedades observáveis (QSAR/QSPR), a aplicação de métodos de inteligência artificial para elucidação estrutural a partir de dados espetroscópicos, a automação do planeamento de sínteses químicas, ou o desenvolvimento de estratégias para o arquivo e visualização de estruturas e informação química.

Publicações internacionais de referência. São revistas de referência nesta área o Journal of Chemical Information and Modeling (ACS), Molecular Informatics (Wiley), Journal of Computer-Aided Molecular Design (Springer) e mais recentemente o Journal of Cheminformatics (Chemistry Central).

Foram publicados em 2003 dois livros de texto que ajudaram a definir a disciplina de Químio-informática e que servem de material pedagógico em cursos de nível graduado e pós graduado:

- Chemoinformatics - a Textbook, Gasteiger, J. Engel, T., Eds.; Wiley-VCH: Weinheim, 2003.
- Leach, A. R.; Gillet, V. J. An Introduction to Chemoinformatics; Kluwer: Dordrecht, 2003.

Ensino da Químio-informática. Em 2006, na Declaração de Obernai, 100 cientistas de 18 países europeus, E.U.A. e Canadá chamaram a atenção para a necessidade não só de treinar especialistas em Químio-informática como também de incorporar conteúdos desta disciplina na formação geral de químicos. O mercado de trabalho e os grupos académicos de investigação em Químio-informática recrutaram inicialmente químicos que trabalharam em áreas com forte envolvimento de computação – como os cálculos de química quântica ou a cristalografia de raios-X – ou que adquiriram formação específica de forma mais ou

menos estruturada. Gradualmente, tem sido formalizado o ensino universitário da Químio-informática, por um lado através da criação de bacharelados e mestrados que visam treinar especialistas para exercer funções químio-informáticas na indústria ou na academia e, por outro, com a inclusão de disciplinas de Químio-informática em cursos de 1º e 2º ciclos de Química e de Farmácia.