

CURSO: BIOQUÍMICA

Turno: INTEGRAL

INFORMAÇÕES BÁSICAS

Currículo 2010	Unidade curricular Fundamentos de Modelagem Molecular e Quimiometria		Departamento CCO-DONA LINDU	
Período 6°	Carga Horária			Código CONTAC BQ046
	Teórica 54	Prática 00	Total 54	
Tipo OBRIGATÓRIA	Habilitação / Modalidade BACHARELADO		Pré-requisito BQ016	Co-requisito --

EMENTA

Representação de moléculas como matrizes de dados (em coordenadas cartesianas e internas). Introdução aos métodos Mecânica Molecular. Introdução aos métodos semi-empíricos (AM1 e PM3) e *ab initio* (Hartree-Fock e DFT). Conjuntos de funções de base. Otimização de geometria e superfícies de energia potencial. Dinâmica molecular. Cálculo de propriedades de interesse. Uso de programas de Química Computacional. Introdução à Quimiometria: definição, preparo dos dados, métodos de validação dos dados, visualização dos dados, conceito de outliers, transformação e processamento dos dados. Análise exploratória dos dados: PCA (análise de componentes principais) e HCA (análise hierárquica de agrupamentos). Modelos de classificação (reconhecimento de padrões): KNN (K-ésimo vizinho mais próximo) e SIMCA. Regressão múltipla variada.

OBJETIVOS

Fornecer ao discente uma sólida base dos conceitos que envolvem a estrutura atômica, de modo que ele possa compreender o comportamento de moléculas e sistemas de interesse.

CONTEÚDO PROGRAMÁTICO

UNIDADES	DIA	SUBUNIDADES
FEVEREIRO		
.	24	Apresentação do curso. Exemplos de aplicações gerais de Modelagem Molecular.
MARÇO		
Introdução	03	Fundamentos Gerais de Modelagem Molecular e Quimiometria.
	10	Representação de moléculas como matrizes de dados (em coordenadas cartesianas e internas)..
Mecânica Clássica	10	Fundamentos gerais da Mecânica Clássica. Introdução aos métodos Mecânica Clássica (MM/DM/MC).
	17	Uso de programas computacionais e aplicações dos métodos de Mecânica Quântica.
Origens da Mecânica Quântica (MQ). Equações. Postulados.	24	Equação da onda Clássica. Operadores. Partícula na Caixa.
	31	Equação de Schödinger. Postulados da Mecânica Quântica.

ABRIL		
Resolução de equações de MQ para resolução de sistemas.	07	Resolução de Equação de Schödinger para o Atomo de Hidrogênio. Atomos Multieletrônicos.
	14	Revisão e aplicação da 1ª avaliação.
	21	Feriado de Tiradentes
Ligação Química	28	Aproximação de Born-Oppenheimer. Orbitais moleculares.
MAIO		
	05	Introdução aos métodos Quânticos: semi-empíricos e <i>ab initio</i> (Hartree-Fock, pós Hartree-Fock e DFT).
	12	Otimização de geometria e superfícies de energia potencial.
	19	Cálculo de propriedades de interesse. Uso de programas de Química Computacional.
	26	Aplicações dos métodos de Mecânica Quântica.
JUNHO		
Introdução à Quimiometria	02	Noções gerais sobre Quimiometria. Preparo e visualização dos dados, conceito de <i>outliers</i> , métodos para processamento dos dados.
	09	Fundamentos de Análise exploratória dos dados: PCA (análise de componentes principais) e HCA (análise hierárquica de agrupamentos). Modelos de classificação (reconhecimento de padrões): KNN (K-ésimo vizinho mais próximo) e SIMCA. Regressão múltipla variada.
	16	Aplicações de Métodos de Análise Quimiométrica na Modelagem Molecular.
	23	Revisão e aplicação da 2ª avaliação.
	30	Revisão de prova. Entrega das atividades do semestre. Revisão de nota.
JULHO		
		Prova Substitutiva (se houver) – a definir

AVALIAÇÃO

- Duas avaliações teóricas individuais: 30 pontos cada.
- Avaliações processuais individuais e em grupo: 40 pontos (resenhas, seminários, trabalhos em grupo e uso de ferramentas de EAD/Portal Didático para avaliação).
- Avaliação substitutiva de **uma** das avaliações que o discente não tenha comparecido: será aplicada em data prevista para a última semana de aula com todo o conteúdo do semestre.

Obs: As notas distribuídas ao longo do semestre serão transformadas para 10,0 pontos no final do mesmo.

As atividades avaliativas podem sofrer alteração de data em função da execução do cronograma.

Não é permitida a gravação/filmagem das aulas exceto com **expressa autorização** do responsável pela disciplina.

BIBLIOGRAFIA BÁSICA

ATKINS, P.W. **Físico-Química**, 6ª Ed., Livros Técnicos e Científicos Ed., Rio de Janeiro, 1999.

RUSSEL, J.B. **Química Geral** vol. 1. Mc. Graw Hill, Makron Books do Brasil Ed., São Paulo, 1994.

MORGON, N.H & COUTINHO, K. (Eds). **Métodos da Química Teórica e Modelagem Molecular**. Editora Livraria da Física, São Pulo, 2007.

BIBLIOGRAFIA COMPLEMENTAR

BATSCHLET, E. Introdução à Matemática para Biocientistas. Ed. Interciência (ED. DA USP), São Paulo, 1978.

CHAGAS, A. P. **Termodinâmica Química**. UNICAMP ED., Campinas, 1999.

CASTELLAN, G. **Fundamentos de Físico-Química**. Livros Técnicos e Científicos Ed., Rio de Janeiro, 1989.

LEVINE, I.N. **Quantum Chemistry**. 4th. Ed. Prentice Hall, Inc. New Jersey, 1991.