

CURSO: BIOQUÍMICA

Turno: Integral

INFORMAÇÕES BÁSICAS

Currículo 2010	Unidade curricular Fundamentos de Modelagem Molecular e Quimiometria			Departamento CCO
Período 6º	Carga Horária			Código CONTAC BQ046
	Teórica 54	Prática --	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

OBJETIVO GERAL: 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	SUBUNIDADES
Origem da Mecânica Quântica	- Experimentos que foram importantes na construção da nova mecânica
Equação da onda Clássica	- Equações diferenciais e sua aplicação na físico-química - Soluções aceitáveis para um sistema físico
Equação de Schödinger	- Equação da onda - Operadores - Normalização de funções - Estudo da Partícula em uma caixa

<p>Postulados da Mecânica Quântica</p> <p>Átomo de Hidrogênio</p> <p>Átomos multieletrônicos</p> <p>Ligação Química</p>	<p>- Resolução de Equação de Schödinger para o átomo de Hidrogênio</p> <p>- Esféricos Harmônicos</p> <p>- Simetria dos orbitais</p> <p>- Equações de Hartree-Fock</p> <p>- Princípio de Pauli</p> <p>- Aproximação de Born-Oppenheimer</p> <p>- A molécula de H₂⁺</p> <p>- Orbitais moleculares</p>
CRONOGRAMA	
<p>- Origem da Mecânica Quântica</p> <p>- Funções de onda clássica; Equação de Schödinger</p> <p>- Postulados da Mecânica Quântica; átomo de Hidrogênio</p> <p>- Átomos multieletrônicos</p> <p>- Ligação Química</p>	
CRITÉRIOS DE AVALIAÇÃO	
<p>Duas avaliações sendo uma individual e outra em grupo e um trabalho em grupo realizado nos computadores do Laboratório de Modelagem Molecular</p>	
BIBLIOGRAFIA BÁSICA	
<p>ATKINS, Físico-Química, 7^a ed., LCT: Rio de Janeiro, 2003</p>	



MINISTÉRIO DA EDUCAÇÃO
UNIVERSIDADE FEDERAL DE SÃO JOÃO DEL-REI
SISTEMA INTEGRADO DE PATRIMÔNIO,
ADMINISTRAÇÃO E CONTRATOS

FOLHA DE ASSINATURAS

Emitido em 2023

PLANO DE ENSINO Nº 3167/2023 - COBIQ (12.38)

(Nº do Protocolo: 23122.034736/2023-03)

(Assinado digitalmente em 05/09/2023 07:37)

TELMA PORCINA VILAS BOAS DIAS

COORDENADOR DE CURSO

COBIQ (12.38)

Matrícula: ###450#3

Visualize o documento original em <https://sipac.ufsj.edu.br/public/documentos/> informando seu número: **3167**, ano: **2023**, tipo: **PLANO DE ENSINO**, data de emissão: **04/09/2023** e o código de verificação: **55c3ea1a0a**