

CURSO: BIOQUÍMICA
Turno: INTEGRAL

INFORMAÇÕES BÁSICAS				
Currículo 2010	Unidade curricular Modelagem Molecular		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
<p>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.</p>

OBJETIVOS
<p>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.</p>

CONTEÚDO PROGRAMÁTICO	
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
Postulados da Mecânica Quântica	
Átomo de Hidrogênio	- Resolução de Equação de Schödinger para o

	átomo de Hidrogênio <input type="checkbox"/> - Esféricos Harmônicos <input type="checkbox"/> - Simetria dos orbitais
Átomos multieletrônicos	- Equações de Hartree-Fock - Princípio de Pauli
Ligação Química	- Aproximação de Born-Oppenheimer - A molécula de H_2^+ <input type="checkbox"/> - Orbitais moleculares
AVALIAÇÃO	
Serão realizadas 03 avaliações nas seguintes datas e com as seguintes pontuações: Primeira Avaliação: 09/09/2014 – 2 pontos Segunda Avaliação: 21/10/2014 – 4 pontos Terceira Avaliação: 09/12/2014 – 4 pontos	
BIBLIOGRAFIA BÁSICA	
- Físico-Química – P. Atkins, Bookman Editora, 8 ed.	



Emitido em 2023

PLANO DE ENSINO Nº 3240/2023 - COBIQ (12.38)

(Nº do Protocolo: 23122.035110/2023-14)

(Assinado digitalmente em 06/09/2023 12:19)

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: **3240**, ano: **2023**, tipo: **PLANO DE ENSINO**, data de emissão: **06/09/2023** e o código de verificação: **a93466b196**