

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.

CRONOGRAMA DE ATIVIDADES

Disciplina: Fundamentos de Modelagem Molecular e Quimiometria	Curso: Bioquímica	Turno: integral	Período 6°
---	-----------------------------	---------------------------	----------------------

Professor (a): Beatriz A. Ferreira/

Carga Horária Semanal			Carga Horária Semestral	Horário
Teórica 03	Prática -	Total 03	54 h/aula	3ª feira: 14:10-17:05 h

UNIDADES	DIA	SUBUNIDADES
AGOSTO		
Introdução	04	Apresentação do curso. Exemplos de aplicações gerais de Modelagem Molecular
	11	Fundamentos Gerais de Modelagem Molecular e Quimiometria
	18	Representação de moléculas como matrizes de dados (em coordenadas cartesianas e internas).
Mecânica Clássica	18	Fundamentos gerais da Mecânica Clássica. Introdução aos métodos Mecânica Clássica (MM/DM/MC).
	25	Uso de programas computacionais e aplicações dos métodos de Mecânica Clássica.
	25	Atividade: aplicação de Métodos de Mecânica Clássica (adiantamento de aulas)
SETEMBRO		
Origens da Mecânica Quântica (MQ). Equações. Postulados.	01	Equação da onda Clássica. Operadores. Partícula na Caixa.
	08	Equação de Schrödinger. Postulados da Mecânica Quântica.
Resolução de equações de MQ para resolução de sistemas.	15	Resolução de Equação de Schrödinger para o Átomo de Hidrogénio. Átomos Multieletrônicos.
Ligação Química	22	Aproximação de Born-Oppenheimer. Orbitais moleculares.
	29	Revisão e 1ª avaliação
OUTUBRO		
	06	XIII CPC/UFSJ
	13-27	Férias Docentes (total de 06 aulas)
	20	VI Jornada Acadêmica de Bioquímica
	28	Elaboração de trabalhos em Grupo – Reposição de 03 aulas
NOVEMBRO		
	03	Introdução aos métodos Quânticos: semi-empíricos e <i>ab initio</i> (Hartree-Fock, Hartree-Fock e DFT).
	10	Otimização de geometria e superfícies de energia potencial. Cálculo propriedades de interesse. Uso de programas de Química Computacional.
	17	Aplicações dos métodos de Mecânica Quântica.
	24	Revisão e 2ª avaliação
DEZEMBRO		
	01º	Noções gerais sobre Quimiometria.
	08	Feriado
	09	Entrega de trabalhos – Fórum – Portal Didático.
	15	Prova substitutiva (se houver). Entrega das atividades do semestre.

CRITÉRIOS DE AVALIAÇÃO

- Duas avaliações teóricas individuais: 30 pontos cada.
- Trabalhos em grupo: 40 pontos (resenhas, seminários, mostra de painéis, ferramentas de EAD/Portal Didático).
- 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.

Férias docentes: reposição de 06 (seis) aulas já definidas no 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.

EISBERG & RESNICK. Física Quântica, 6ª Ed., Campus, Ed., Rio de Janeiro, 1988.

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

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



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

FOLHA DE ASSINATURAS

Emitido em 27/04/2023

PLANO DE ENSINO Nº 1200/2023 - COBIQ (12.38)

(Nº do Protocolo: NÃO PROTOCOLADO)

(Assinado digitalmente em 28/04/2023 10:01)

TELMA PORCINA VILAS BOAS DIAS

COORDENADOR DE CURSO - TITULAR

COBIQ (12.38)

Matrícula: 2045083

Para verificar a autenticidade deste documento entre em <https://sipac.ufsj.edu.br/public/documentos/> informando seu número: **1200**, ano: **2023**, tipo: **PLANO DE ENSINO**, data de emissão: **27/04/2023** e o código de verificação: **f6de5946eb**