

<b>CURSO: BIOQUÍMICA</b>
<b>Turno: INTEGRAL</b>

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

<b>EMENTA</b>	
<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>	
<b>OBJETIVOS</b>	
<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>	
<b>CONTEÚDO PROGRAMÁTICO</b>	
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□ - Esféricos Harmônicos□- Simetria dos orbitais
Átomos multieletrônicos	- Equações de Hartree-Fock - Princípio de Pauli
Ligação Química	- Aproximação de Born-Oppenheimer - A molécula de H <sub>2</sub> <sup>+</sup> □ - Orbitais moleculares

### AVALIAÇÃO

Serão realizadas **03** avaliações com as seguintes pontuações:

Primeira Avaliação: **3 pontos**

Segunda Avaliação: **3 pontos**

Terceira Avaliação (trabalho em grupo): **4 pontos**

### BIBLIOGRAFIA BÁSICA

- Físico-Química – P. Atkins, Bookman Editora, 8 ed.
- Métodos em Química Teórica e Modelagem Molecular, N. Morgon e K. Coutinho, Editora da Física, 1ed., 2007
- Fundamentos de Física, J; Walker, volume 4 LTC, 8 ed., 2009

### BIBLIOGRAFIA COMPLEMENTAR

- Físico-Química, W. J. Moore, Edgard Blucher, 4 ed., 2006
- Fundamentos de Físico-Química, G. Castellan, LTC, 1 ed. 2009
- Understanding Molecular Simulation, D. Frenkel e B. Smit, Academic Press, 1ed, 2002
- Molecular Modeling, A. D. Höltje, Wiley, 3ed, 2008
- Física Moderna, P. Tipler, 3ed, LTC, 2001
- Artigos científicos envolvendo o uso destas técnicas



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 1744/2023 - COBIQ (12.38)**

**(Nº do Protocolo: NÃO PROTOCOLADO)**

*(Assinado digitalmente em 17/05/2023 11:36 )*

**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: **1744**, ano: **2023**, tipo: **PLANO DE ENSINO**, data de emissão: **16/05/2023** e o código de verificação:

**960c06096a**