

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
<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□ - Esféricos Harmônicos□- Simetria dos orbitais
Átomos multieletrônicos	- Equações de Hartree-Fock - Princípio de Pauli
Ligação Química	- Aproximação de Born-Oppenheimer - A molécula de H ₂ ⁺ □ - Orbitais moleculares
AVALIAÇÃO	
<p>Serão realizadas 03 avaliações com as seguintes pontuações: Primeira Avaliação Teórica Individual: 4 pontos Segunda Avaliação Teórica em Grupo: 3 pontos Trabalho em grupo : 3 pontos IMPORTANTE: PARA OS ALUNOS EM REGIME RER PODERÁ HAVER UMA TERCEIRA AVALIAÇÃO TEÓRICA (desde que valha para todo o grupo de alunos) VALENDO 3 PONTOS EM LUGAR DO TRABALHO EM GRUPO</p>	
BIBLIOGRAFIA BÁSICA	
<ul style="list-style-type: none"> - 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	
<ul style="list-style-type: none"> - 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 	



Emitido em 2023

PLANO DE ENSINO Nº 1680/2023 - COBIQ (12.38)

(Nº do Protocolo: NÃO PROTOCOLADO)

(Assinado digitalmente em 16/05/2023 09:10)

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: **1680**, ano: **2023**, tipo: **PLANO DE ENSINO**, data de emissão: **15/05/2023** e o código de verificação: **3e15fa69cd**