

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.

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
Introdução à Quimiometria	- Noções gerais sobre Quimiometria. - Fundamentos de Análise exploratória dos dados e de Modelos de classificação. Regressão múltipla variada.

AVALIAÇÃO

- Duas avaliações teóricas individuais: 30 pontos cada.
- Avaliações processuais individuais e em grupo: 40 pontos (resenhas, seminários, trabalhos em grupo e uso de ferramentas de EAD/Portal Didático para avaliação).
- 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.

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.

RUSSEL, J.B. **Química Geral** vol. 1. Mc. Graw Hill, Makron Books do Brasil Ed., São Paulo, 1994.

MORGON, N.H & COUTINHO, K. (Eds). **Métodos da Química Teórica e Modelagem Molecular**. Editora Livraria da Física, São Pulo, 2007.

BIBLIOGRAFIA COMPLEMENTAR

BATSCHULET, 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.



Emitido em 2023

PLANO DE ENSINO Nº 1497/2023 - COBIQ (12.38)

(Nº do Protocolo: NÃO PROTOCOLADO)

(Assinado digitalmente em 12/05/2023 11:49)

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: **1497**, ano: **2023**, tipo: **PLANO DE ENSINO**, data de emissão: **11/05/2023** e o código de verificação: **2d2d7e5aa6**