



Universidade Federal
de São João del-Rei

UNIVERSIDADE FEDERAL DE SÃO JOÃO DEL-REI – UFSJ
INSTITUÍDA PELA LEI Nº 10.425, DE 19/04/2002 – D.O.U. DE 22/04/2002
PRÓ-REITORIA DE ENSINO DE GRADUAÇÃO – PROEN

CURSO: Bioquímica	Turno: Integral
Ano: 2018	Semestre: 02
Docente Responsável: Beatriz Alves Ferreira	

INFORMAÇÕES BÁSICAS				
Currículo 2010	Unidade curricular Fundamentos de Modelagem Molecular e Quimiometria		Departamento CCO	
Período 6º	Carga Horária			Código CONTAC BQ046
	Teórica 54h	Prática -	Total 54h	
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	
Introdução	Apresentação do curso. Exemplos de aplicações gerais de Modelagem Molecular Fundamentos Gerais de Modelagem



Mecânica Clássica	Molecular e Quimiometria Representação de moléculas como matrizes de dados (em coordenadas cartesianas e internas).
Origens da Mecânica Quântica (MQ). Equações. Postulados.	Fundamentos gerais da Mecânica Clássica. Introdução aos métodos Mecânica Clássica (MM/DM/MC). Uso de programas computacionais e aplicações dos métodos de Mecânica Clássica.
Resolução de equações de MQ para resolução de sistemas.	Equação da onda Clássica. Operadores. Partícula na Caixa. Equação de Schödinger. Postulados da Mecânica Quântica
Ligação Química	Resolução de Equação de Schödinger para o Átomo de Hidrogênio. Átomos Multieletrônicos.
Métodos Quânticos	Aproximação de Born-Oppenheimer. Orbitais moleculares.
Quimiometria	Introdução aos métodos Quânticos: semi-empíricos e <i>ab initio</i> (Hartree-Fock, pós Hartree-Fock e DFT) Otimização de geometria e superfícies de energia potencial. Cálculo de propriedades de interesse. Uso de programas de Química Computacional. Aplicações dos métodos de Mecânica Quântica.
	Noções gerais sobre Quimiometria.
METODOLOGIA DE ENSINO	
Aulas expositivas e dialogadas com recurso data show, uso do portal didático para desenvolvimento de atividades avaliativas diversas, seminários, palestras, fóruns de discussão e simulação de aulas experimentais.	
CRITÉRIOS DE AVALIAÇÃO	
• Duas avaliações teóricas individuais: 30 pontos cada (presencial e Portal Didático)	



- Trabalhos em grupo: 40 pontos (resenhas, seminários, mostra de painéis, ferramentas de EAD/Portal Didático).
- Avaliação em segunda chamada: somente para casos de óbito de parentes até 2º-grau, alistamento militar/exército ou intimação de Justiça (incluindo a serviço da Justiça Eleitoral), mediante apresentação de documento comprobatório.
- Avaliação Substitutiva: 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.

BIBLIOGRAFIA BÁSICA

ATKINS, P.W. **Físico-Química**, 6ª Ed., Livros Técnicos e Científicos Ed., Rio de Janeiro, 2008.

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

LEVINE, I.N. **Quantum Chemistry**. 5th. Ed. Prentice Hall, Inc. New Jersey, 2008..

BIBLIOGRAFIA COMPLEMENTAR

BATSCHLET, E. Introdução à Matemática para Biocientistas. Ed. Interciência (ED. DA USP), São Paulo, 1978.

CASTELLAN, G. **Fundamentos de Físico-Química**. Livros Técnicos e Científicos Ed., Rio de Janeiro, 2007.

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



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

FOLHA DE ASSINATURAS

Emitido em 08/05/2023

PLANO DE ENSINO Nº 1437/2023 - COBIQ (12.38)

(Nº do Protocolo: NÃO PROTOCOLADO)

(Assinado digitalmente em 09/05/2023 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: **1437**, ano: **2023**, tipo: **PLANO DE ENSINO**, data de emissão: **08/05/2023** e o código de verificação: **d116954fa4**