



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

<b>CURSO: Bioquímica</b>	<b>Turno: Integral</b>
<b>Ano: 2019</b>	<b>Semestre: 2º</b>
<b>Docente Responsável: Beatriz A. Ferreira</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> 6º	<b>Carga Horária</b>			<b>Código CONTAC</b> BQ046
	<b>Teórica</b> 54h	<b>Prática</b> 00	<b>Total</b> 54h	
<b>Tipo</b> Obrigatória	<b>Habilitação / Modalidade</b> Bacharelado		<b>Pré-requisito</b> BQ016	<b>Co-requisito</b> -

<b>EMENTA</b>
Representação de moléculas como matrizes de dados (em coordenadas cartesianas e internas). Introdução aos métodos Mecânica Molecular. Introdução aos métodos semiempíricos (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.
<b>OBJETIVOS</b>
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

Introdução ao Curso	- Noções sobre Modelagem Molecular e Quimiometria.
Mecânica Clássica	- Formulação da Mecânica Clássica - Métodos da Mecânica Clássica: Mecânica Molecular, Dinâmica Molecular, Método de Monte Carlo.
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 Schrödinger	- Equação da onda - Operadores - Normalização de funções - Estudo da Partícula em uma caixa.
Postulados da Mecânica Quântica	
Átomo de Hidrogênio	- Resolução de Equação de Schrödinger 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. - Análise exploratória dos dados e de Modelos de classificação. Regressão múltipla variada



### 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:** 35 pontos cada (presencial e/ou Portal Didático).
- **Avaliações processuais individuais e em grupo:** 30 pontos (resenhas, seminários, trabalhos em grupo e uso de ferramentas de EAD/Portal Didático para avaliação).
- **Avaliação substitutiva:** será aplicada em data prevista para a última semana de aula com todo o conteúdo do semestre, oferecida para uma das avaliações de 35 pontos de acordo com os seguintes critérios: exclusivamente para os alunos que não foram aprovados na disciplina, ou seja, não atingiram a média de 60%. Só poderão realizar a avaliação substitutiva, os discentes que alcançarem nota entre 50,0 e 59,0 pontos (5,0 e 5,9). A nota obtida nesta prova substituirá a nota de apenas uma das avaliações, exceto quando a nota obtida for inferior à nota anterior. O discente que realizar a avaliação substitutiva e for aprovado na disciplina ficará com a média final igual a 60,0 pontos (6,0).
- **Segunda chamada:** será aplicada em acordo com o disposto no artigo 18 da seção VII da Resolução 12 de 04/04/2018 CONEP.

#### OBS:

- As atividades avaliativas podem sofrer alteração de data em função da execução do cronograma.
- Não é permitida a gravação/filmagem/fotografia das aulas exceto com expressa autorização do responsável pela disciplina.
- As notas distribuídas durante o semestre serão transformadas para 10,0 pontos ao seu final. As atividades avaliativas podem sofrer alteração de formato e data.

### BIBLIOGRAFIA BÁSICA

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



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

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.



---

*Emitido em 03/05/2023*

**PLANO DE ENSINO Nº 1314/2023 - COBIQ (12.38)**

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

*(Assinado digitalmente em 03/05/2023 11:07 )*

**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: **1314**, ano: **2023**, tipo: **PLANO DE ENSINO**, data de emissão: **03/05/2023** e o código de verificação: **3df76547bd**