



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: 2020	Semestre: 2º Remoto
Docentes Responsáveis: Beatriz A. Ferreira e Luiz Guilherme M. de Macedo	

INFORMAÇÕES BÁSICAS				
Currículo 2020	Unidade curricular Fundamentos de Modelagem Molecular e Quimiometria – PE		Departamento CCO	
Período -	Carga Horária			Código CONTAC BQ146
	Teórica 54h/a	Prática -	Total 54h/a	
Tipo Optativa	Habilitação / Modalidade Bacharelado	Pré-requisito Físico-Química II	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 <i>ab initio</i> (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
1. Introdução



Fundamentos Gerais de Modelagem Molecular e Quimiometria.

Representação de moléculas como matrizes de dados. Exemplos.

2. Mecânica Clássica

Fundamentos gerais e introdução aos métodos da Mecânica Clássica.

Uso de programas computacionais e aplicações dos métodos de Mecânica Clássica.

3. Mecânica Quântica

Origens da Mecânica Quântica (MQ). Equações. Postulados.

Resolução de equações da MQ para átomo de hidrogênio e átomos multieletrônicos.

Ligação Química. Aproximação de Born-Oppenheimer. Orbitais moleculares. Teoria dos Orbitais Moleculares.

Introdução aos Métodos Quânticos: semiempíricos e *ab initio* (HF, pós HF e DFT).

Uso de programas de Química Computacional e cálculo de propriedades de interesse.

Aplicações dos Métodos de MQ na área de Bioquímica.

4. Noções sobre análise quimiométrica.

METODOLOGIA DE ENSINO

O conteúdo será ministrado em 28 h de atividades síncronas e 26 de atividades assíncronas, por meio, preferencialmente, das ferramentas disponíveis no Portal Didático da UFSJ (*Moodle*). Poderão ainda ser utilizados outros recursos como *Google Suite* e *Zoom*. A utilização de metodologias ativas de aprendizado, com diferentes abordagens e avaliação processual serão priorizadas. As atividades síncronas não serão gravadas.

O horário para atividades **síncronas (2h/a semana, totalizando 28 h/a)** será às **3as feiras: 10:00-11:50h**. O horário de atendimento aos alunos será definido no início do



semestre letivo. Dúvidas individualizadas fora desse horário devem ser enviadas pelo Portal Didático da UFSJ e serão respondidas em até 24 h úteis.

CONTROLE DE FREQUÊNCIA E CRITÉRIOS DE AVALIAÇÃO

Controle de frequência: A frequência do discente será lançada de acordo com a realização das atividades propostas. Para aprovação, o discente deverá realizar, no mínimo, 75% das atividades propostas.

CrITÉRIOS de Avaliação:

- **Três avaliações teóricas:** 25 pontos cada.
- **Trabalhos em grupo:** 25 pontos (resenhas, fóruns de discussão, Estudo Dirigido).
- **Avaliação substitutiva:** Para realizar a Avaliação Substitutiva o aluno deverá ter obtido na Nota Final pontuação entre 5,0 (50) e 5,9 (59). Alunos que tenham obtido Notas Finais maiores que 5,9 (59) ou menores que 5,0 (50) não terão direito à substituição de nota, não podendo por conseguinte realizar a Avaliação Substitutiva. Essa Avaliação será aplicada em data prevista para a última semana de aula com todo o conteúdo do semestre.

Aplicação de Avaliações: Portal Didático da UFSJ; alternativamente, por questões técnicas, poderá ser utilizada a Plataforma *Google Classroom*. A substituição será sempre avisada com antecedência.

Não é permitida a gravação/filmagem/fotografia/divulgação do conteúdo disponibilizado exceto com expressa autorização do responsável pela disciplina.

Obs: As notas distribuídas ao longo do semestre serão transformadas para 10,0 pontos ao final do mesmo.

Todas as atividades avaliativas descritas em “critérios de avaliação” serão realizadas de forma assíncrona.

As atividades avaliativas podem sofrer alteração de data em função da execução do cronograma de atividades.

Sábados são considerados dias letivos e atividades assíncronas eventualmente



poderão ser desenvolvidas e/ou entregues.

BIBLIOGRAFIA BÁSICA

Eisberg & Resnick. Física Quântica. 9 ed. Editora Campus, Rio de Janeiro, 1994.

Morgon, Nelson H. & Kaline Coutinho (orgs) Métodos de Química Teórica e Modelagem Molecular. Ed. Livraria da Física, São Paulo, 2007.

Atkins, P.; de Paula, J. Físico-Química, volume 1, 8ª edição. Livros Técnicos e Científicos Editora, Rio de Janeiro, 2008.

Atkins, P.; de Paula, J. Físico-Química, volume 2, 8ª edição. Livros Técnicos e Científicos Editora, Rio de Janeiro, 2008.

BIBLIOGRAFIA COMPLEMENTAR

Levine, I. N. - Quantum Chemistry , 6th ed. - Pearson, 2013

Castellan, G. Fundamentos de Físico-Química. Livros Técnicos e Científicos Editora, Rio de Janeiro, 1986.

Atkins, P.; de Paula, J. Físico-Química Biológica. Livros Técnicos e Científicos Editora, Rio de Janeiro, 2008.

Haynie, D. T. Biological Thermodynamics, 2ª edição, Cambridge University Press, Nova Iorque, 2008.



Emitido em 13/07/2021

PLANO DE ENSINO Nº 367/2021 - COBIQ (12.38)

(Nº do Protocolo: NÃO PROTOCOLADO)

(Assinado digitalmente em 13/07/2021 16:10)

BEATRIZ ALVES FERREIRA
PROFESSOR DO MAGISTERIO SUPERIOR
CCO (10.02)
Matrícula: 1188846

(Assinado digitalmente em 13/07/2021 16:06)

LUIZ GUILHERME MACHADO DE MACEDO
PROFESSOR DO MAGISTERIO SUPERIOR
CCO (10.02)
Matrícula: 1712829

(Assinado digitalmente em 14/07/2021 09:01)

TELMA PORCINA VILAS BOAS DIAS
COORDENADOR DE CURSO
COBIQ (12.38)
Matrícula: 2045083

Para verificar a autenticidade deste documento entre em <https://sipac.ufsj.edu.br/public/documentos/> informando seu número: **367**, ano: **2021**, tipo: **PLANO DE ENSINO**, data de emissão: **13/07/2021** e o código de verificação: **423e0530d5**