



Universidade Federal
de São João del-Rei

COORDENADORIA DO CURSO DE QUÍMICA PLANO DE ENSINO

Unidade Curricular: Introdução à Química Computacional				Período: 8º	Currículo: 2019
Docente: Clebio Soares Nascimento Júnior				Unidade Acadêmica: DCNAT	
Pré-requisito: Fundamentos de Química Quântica			Co-requisito: -		
C.H. Total: 33h/36ha	C.H. Prática: -	C. H. Teórica: -	Grau: BACH	Ano: 2026	Semestre: 2º
EMENTA					
Histórico da Química Computacional, Mecânica Molecular, Análise Conformacional, Dinâmica Molecular, Métodos semi-empíricos, Teoria do Funcional de Densidade, Cálculo de Propriedades Moleculares.					
OBJETIVOS					
Obter uma visão geral e introdutória da Química Computacional, bem como, de algumas metodologias cálculo, abordando suas vantagens e desvantagens. A ideia principal é que o aluno ao final do curso adquira uma noção geral da química computacional e saiba identificar qual das metodologias abordadas é mais adequada para certo tipo de sistema, dependendo da propriedade de interesse. A ideia é de um curso focado na aplicação da química computacional e não rigor matemático inerente à cada metodologia teórica.					
CONTEÚDO PROGRAMÁTICO					
1- Introdução à Química Computacional;					
2- Aspectos históricos da Química Computacional;					
3- Princípios de Mecânica Molecular: Campos de força, energia estérica, minimização de energia;					
4- Análise Conformacional: Ângulos diedros, confôrmeros, superfície de energia potencial, mínimos locais e globais;					
5- Dinâmica Molecular Clássica: Equações de movimento, flutuação de energias ao longo do tempo;					
6- Docking Molecular: Planejamento Racional de Fármacos;					
7- Métodos semi-empíricos: Elétrons de valência, parametrização, Métodos de Pople e Dewar;					
8- A Teoria do Funcional de Densidade: Histórico, teoremas fundamentais, funcionais LDA, puros e híbridos;					
9- Cálculo de orbitais HOMO-LUMO, momento de dipolo, eletronegatividade, mapa de potencial eletrostático.					
METODOLOGIA DE ENSINO E RECURSOS AUXILIARES					
Aulas expositivas utilizando o quadro e data show.					
FORMA E CRONOGRAMA DE AVALIAÇÃO					
Durante o curso serão aplicados 3 seminários S1, S2 e S3, valendo 10,0 pontos cada um. A média parcial (MP) será obtida da seguinte forma: Se $MP = \frac{S_1 + S_2 + S_3}{3} \geq 6,0$ o aluno estará automaticamente aprovado. Se $MP = \frac{S_1 + S_2 + S_3}{3} < 6,0$ o aluno, poderá, ainda, fazer um seminário substitutivo (SB) envolvendo o conteúdo do seminário que aluno tirou a menor nota. Assim, a nota do seminário (SB) substituirá a menor nota entre S1, S2 e S3. Portanto, ao final do SB cria-se uma média final chamada MF. Finalmente, se $MF \geq 6,0$ o aluno estará aprovado. Caso contrário, se $MF < 6,0$ o aluno estará reprovado. OBS: Estarão aptos, portanto, a fazer o seminário SUB aqueles estudantes que obtiverem média parcial MP entre 4,0 e 5,9.					

BIBLIOGRAFIA BÁSICA

Morgon, N. H.; Coutinho, *Métodos de Química Teórica e Modelagem Molecular*, 1a ed., Livraria da Física: São Paulo, 2007.
Cramer, C.J.; *Essentials of Computational Chemistry. Theories and Models*. 2a ed., John Wiley & Sons: Chichester, 2004.

BIBLIOGRAFIA COMPLEMENTAR

Hollauer, E. *Química Quântica*. Rio de Janeiro: LTC, 2008.
Eisberg, R.; Resnick, R., *Física Quântica*, 9ª ed., Campus: São Paulo, 1994.



Documento assinado digitalmente

CLEBIO SOARES NASCIMENTO JUNIOR

Data: 03/07/2026 09:09:33-0300

Verifique em <https://validar.iti.gov.br>



Documento assinado digitalmente

STELLA MARIS RESENDE

Data: 18/08/2026 15:35:52-0300

Verifique em <https://validar.iti.gov.br>

Coordenador do Curso