



Universidade Federal
de São João del-Rei

COORDENADORIA DO CURSO DE QUÍMICA PLANO DE ENSINO

Unidade Curricular: Introdução à Química Computacional				Período: 8º	Currículo: 2014												
Docente: Clebio Soares Nascimento Júnior				Unidade Acadêmica: DCNAT													
Pré-requisito: Fundamentos de Química II			Co-requisito: -														
C.H. Total: 36ha	C.H. Prática: -	C. H. Teórica: -	Grau: BACH	Ano: 2021	Semestre: 1º Remoto												
EMENTA																	
Histórico da Química Computacional, Mecânica Molecular, Análise Conformacional, Dinâmica Molecular, Hartree-Fock, Métodos semi-empíricos, Métodos híbridos, 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- Mecânica Quântica Molecular: O método de Hartree-Fock; 8- Métodos semi-empíricos: Elétrons de valência, parametrização, Métodos de Pople e Dewar; 9- Métodos híbridos de cálculo QM/MM; 10- A Teoria do Funcional de Densidade: Histórico, teoremas fundamentais, funcionais LDA, puros e híbridos; 11- Cálculo de orbitais HOMO-LUMO, momento de dipolo, eletronegatividade, mapa de potencial eletrostático.																	
METODOLOGIA DE ENSINO E RECURSOS AUXILIARES																	
- A disciplina combinará atividades síncronas e assíncronas, conforme descritas na Tabela abaixo:																	
<table><tr><th>Descrição das Atividades</th><th>Síncrona</th><th>Assíncrona</th></tr><tr><td>Aulas expositivas dos conteúdos</td><td>X</td><td></td></tr><tr><td>Seminários</td><td></td><td>X</td></tr><tr><td>Leitura de material didático, artigos e etc</td><td></td><td>X</td></tr></table>			Descrição das Atividades	Síncrona	Assíncrona	Aulas expositivas dos conteúdos	X		Seminários		X	Leitura de material didático, artigos e etc		X			
Descrição das Atividades	Síncrona	Assíncrona															
Aulas expositivas dos conteúdos	X																
Seminários		X															
Leitura de material didático, artigos e etc		X															
- A plataforma escolhida para as atividades síncronas será o Google Meet .																	
- Todos os materiais referentes ao curso serão disponibilizados no Google Classroom, tais como material referente aos conteúdos para leitura prévia, artigos e etc.																	
- Os seminários deverão ser elaborados pelos alunos, de forma assíncrona, na forma de vídeo gravado para ser entregue, posteriormente, ao professor.																	
- As demandas de equipamentos e de conexão necessárias para o aproveitamento adequado por parte dos discentes são: computador (desktop ou notebook) ou aparelho celular com suporte para conexão à plataforma Google Meet; acesso à internet compatível com a conexão à referida plataforma. Preferencialmente recomenda-se o uso de desktop ou notebook nas atividades síncronas.																	

FORMA E CRONOGRAMA DE AVALIAÇÃO

- O registro da frequência do discente se dará por meio do cumprimento das atividades propostas, e não pela presença durante as atividades síncronas, sendo que o discente que não concluir 75% das atividades propostas será reprovado por infrequência.
- Durante o curso serão aplicados 3 seminários S1, S2 e S3, valendo 10,0 pontos cada. Se a Nota final (NF) do aluno for $NF = \frac{S_1 + S_2 + S_3}{3} \geq 6,0$, ele estará automaticamente aprovado. Se $NF < 6,0$ o aluno poderá ainda fazer um seminário substitutivo (SUB). A nota do seminário SUB substituirá a menor nota entre S1, S2 e S3. Finalmente, se $NF \geq 6,0$ o aluno estará aprovado. Caso contrário, se $NF < 6,0$ o aluno estará reprovado.
- Carga-horária de atividades síncronas: Estima-se que as aulas síncronas totalizarão 24ha, a serem distribuídas dentro das 14 semanas.
- Carga-horária de atividades assíncronas: As atividades assíncronas (leitura prévia de material, artigos, elaboração de seminários) totalizarão 12ha a serem distribuídas dentro das 14 semanas. Obviamente, as atividades assíncronas serão realizadas pelo discente em horário diferente das atividades síncronas.

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.

Prof. Clebio Soares Nascimento Jr.

Aprovado pelo Colegiado em 11/05/2021

Coordenador do Curso



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

FOLHA DE ASSINATURAS

Emitido em 2021

PLANO DE ENSINO Nº 207/2021 - COQUI (12.71)

(Nº do Protocolo: NÃO PROTOCOLADO)

(Assinado digitalmente em 13/05/2021 15:58)

CLEBIO SOARES NASCIMENTO JUNIOR

PROFESSOR DO MAGISTERIO SUPERIOR

DCNAT (12.12)

Matrícula: 1721586

(Assinado digitalmente em 12/05/2021 12:18)

PATRICIA BENEDINI MARTELLI

COORDENADOR DE CURSO - TITULAR

CHEFE DE UNIDADE

COQUI (12.71)

Matrícula: 1348442

Para verificar a autenticidade deste documento entre em <https://sipac.ufsj.edu.br/documentos/> informando seu número: **207**, ano: **2021**, tipo: **PLANO DE ENSINO**, data de emissão: **12/05/2021** e o código de verificação: **20f53a5544**