



Universidade Federal
de São João del-Rei

PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM QUÍMICA - PPGQ

PLANO DE ENSINO

Unidade Curricular: Introdução a Química Informática: Avanços Recentes e Tendências

Currículo:
2025

Docente Responsável: Egon Campos Dos Santos

Unidade Acadêmica:
DCNAT

C.H. Total: 60 h

Ano: 2026

Semestre: 2º Semestre

EMENTA

Catálise heterogênea, química computacional, microcinética de reações, química informática e banco de dados.

OBJETIVOS

O curso tem como objetivo promover a compreensão e a aplicação de conceitos avançados em catálise heterogênea, com ênfase no uso de ferramentas de química computacional e na modelagem microcinética de reações químicas. Além disso, busca-se estimular o desenvolvimento de habilidades em química informática e no uso de bancos de dados científicos. A metodologia inclui apresentações orais em formato de slides. **Haverá aulas de acompanhamento com o professor, nas quais os alunos serão responsáveis por expor e discutir os temas abordados, favorecendo a construção ativa do conhecimento e a prática da comunicação científica.**

CONTEÚDO PROGRAMÁTICO

Conceitos Gerais sobre Química Computacional, Catálise, e Química Informática

- Conceitos gerais sobre catálise
- Fatores que influenciam a atividade catalítica
- Princípios básicos da química computacional
- Teoria do funcional da densidade (DFT)
- Química informáticas e banco de dados
- Banco de dados na catálise

Seminários, Apresentações e Escrita Científica

- Leitura e interpretação de artigos científicos em português e inglês
- Elaboração e apresentação de seminários em grupo.
- Discussão crítica dos temas abordados.
- Prática de comunicação científica por meio de apresentações em slides (PowerPoint).
- Produção de textos em formato de **escrita científica simplificada**.

FORMA E CRONOGRAMA DE AVALIAÇÃO

A avaliação da disciplina será composta por três componentes. O primeiro consiste em uma prova escrita individual, com valor de **2,0 pontos**, abrangendo o conteúdo introdutório ministrado pelo professor em sala de aula. O segundo componente será **duas** apresentações orais valendo **3,0 pontos**. O terceiro componente corresponde a uma dinâmica de grupo, na qual os alunos deverão elaborar e apresentar um pequeno relatório, no valor de **2,0 pontos**, integrando e correlacionando os temas discutidos ao longo das atividades. A nota final é a soma das quatro avaliações. Os estudantes que obtiverem nota final entre **4,0 e 5,9** poderão realizar uma prova substitutiva individual, valendo **3,0 pontos**. Essa avaliação contemplará todo o conteúdo desenvolvido durante o curso e substituirá a menor nota obtida entre as duas apresentações em grupo.

BIBLIOGRAFIA

- [1] NØRSKOV, Jens K.; STUDDT, Felix; ABILD-PEDERSEN, Frank; BLIGAARD, Thomas. *Fundamental concepts in heterogeneous catalysis*. Hoboken: John Wiley & Sons, 2014.
- [2] LEWARS, Errol G. *Computational chemistry: introduction to the theory and applications of molecular and quantum mechanics*. 3. ed. Dordrecht: Springer, 2016.
- [3] ENGEL, Eberhard; DREIZLER, Reiner M. *Density functional theory: an advanced course*. Dordrecht: Springer, 2011.
- [4] JENSEN, Frank. *Introduction to computational chemistry*. 2. ed. Chichester: John Wiley & Sons, 2007.
- [5] ATKINS, Peter; FRIEDMAN, Ronald. *Molecular quantum mechanics*. 5. ed. Oxford: Oxford University Press, 2011.



Documento assinado digitalmente
EGON CAMPOS DOS SANTOS
Data: 03/07/2026 07:56:05-0300
Verifique em <https://validar.iti.gov.br>

Egon Campos Dos Santos

Docente Responsável

Aprovado pelo Colegiado
em 03/07/2026.

Coordenador do Curso