



UNIVERSIDADE FEDERAL DE UBERLÂNDIA



FICHA DE COMPONENTE CURRICULAR

CÓDIGO:	COMPONENTE CURRICULAR: MODELAGEM MOLECULAR APLICADA À PESQUISA E AO ENSINO	
UNIDADE ACADÊMICA OFERTANTE: INSTITUTO DE QUÍMICA		SIGLA: IQUFU
CH TOTAL TEÓRICA: 00 HORAS	CH TOTAL PRÁTICA: 30 HORAS	CH TOTAL: 30 HORAS

1. OBJETIVOS

Apresentar aos discentes as possibilidades de utilização das ferramentas computacionais para fins de pesquisa e/ou no ensino de química.

2. EMENTA

Ancoragem molecular; dinâmica molecular; cálculos quânticos.

3. PROGRAMA

1. Ancoragem molecular

1. 1 Fundamentos da técnica; ancoragem cega; ancoragem baseada em modelo; aplicação da ancoragem molecular no processo de busca de candidatos a fármacos e no ensino de bioquímica e enzimiologia

2. Dinâmica Molecular

2. 1 Fundamentos da técnica; dinâmica molecular clássica e *ab initio*

2. 2 Aplicação da dinâmica molecular na Indústria: nanoestruturas de carbono, celulose, nanosensores e fármacos

2. 3 Aplicação da dinâmica molecular no Ensino de Química: equilíbrio químico, entalpia, efeitos da temperatura na interação dos compostos

3. Cálculos *ab initio*

3. 1 Fundamentos da técnica; aplicação da Teoria do Funcional da Densidade à interação entre moléculas orgânicas e superfícies, à compostos químicos industriais altamente reativos e à conversão de metano em metanol

3. 2 Aplicação no Ensino de Química: centros reacionais, estabilidade de estruturas e estados de transição

4. BIBLIOGRAFIA BÁSICA

ATKINS, P.W., **Físico-química**. 9. ed. Rio de Janeiro: LTC, 2012. v1 e v2

EISBERG, R.; RESNICK, R., **Física quântica**: átomos, moléculas, sólidos, núcleos e partículas. 9. ed. Rio de Janeiro: Campus, 1994.

LEVINE, I. N., **Físico - química**, 6. ed. Rio de Janeiro: LTC, 2012.

5. BIBLIOGRAFIA COMPLEMENTAR

CASTELLAN, G. W. **Físico – química**. 1. ed. Rio de Janeiro: LTC, 1976.

EOM, KILHO. **Simulations in nanobiotechnology**, New York, CRC, 2012.

JENSEN, F., **Introduction to computational chemistry**, 2. ed. New York: John Wiley & Sons, 2007.

MEUNIER, MARC. **Industrial applications of molecular simulations**, New York, CRC, 2016.

MORGON, N. H.; COUTINHO, K. **Métodos de química teórica e modelagem molecular**. 1. ed. São Paulo: Livraria da Física, 2007.

6. APROVAÇÃO

Fábio Augusto do Amaral
Coordenador do Curso de Licenciatura em Química

Nivia Maria Melo Coelho
Diretora do Instituto de Química



Documento assinado eletronicamente por **Fábio Augusto do Amaral, Coordenador(a)**, em 25/04/2019, às 11:08, conforme horário oficial de Brasília, com fundamento no art. 6º, § 1º, do [Decreto nº 8.539, de 8 de outubro de 2015](#).



Documento assinado eletronicamente por **Nivia Maria Melo Coelho, Diretor(a)**, em 29/05/2019, às 10:51, conforme horário oficial de Brasília, com fundamento no art. 6º, § 1º, do [Decreto nº 8.539, de 8 de outubro de 2015](#).



A autenticidade deste documento pode ser conferida no site https://www.sei.ufu.br/sei/controlador_externo.php?acao=documento_conferir&id_orgao_acesso_externo=0, informando o código verificador **1128807** e o código CRC **8B5EC96D**.