



UNIVERSIDADE FEDERAL DE OURO PRETO

Campus Morro do Cruzeiro

Bauxita, Ouro Preto – MG

## 1- IDENTIFICAÇÃO

<b>1.1 - Curso:</b> Química Industrial	
<b>1.2 - Disciplina:</b> Introdução aos Métodos de Química Computacional	<b>1.3 - Carga Horária:</b> 45h/a
<b>1.4 - Semestre:</b> 2º	<b>1.5 - Ano Letivo:</b> 2018
<b>1.6 - Professora:</b> Melissa Soares Caetano	melissa.soares@ufop.edu.br

## 2- EMENTA

- |                               |                                      |
|-------------------------------|--------------------------------------|
| I) Química Quântica           | IV) Teoria do funcional de densidade |
| II) Métodos de Hartree Fock   | V) Métodos Semi-empíricos            |
| III) Métodos pós Hartree Fock | VI) Mecânica Molecular               |

## 3 - AVALIAÇÃO

- I- provas teóricas: Três provas abordando o conteúdo das aulas teóricas com o valor de 2,0 pontos cada uma
- II- seminário: Dois seminários com o valor de 2,0 pontos cada.

## 4 - CRONOGRAMA DAS ATIVIDADES

**Aulas:** Quartas-feiras 15:20–17:50 horas

Data	Aula
15/08/2018	Apresentação da disciplina
22/08/2018	Química medicinal – planejamento de fármacos
29/08/2018	Mecânica Molecular
05/09/2018	Mecânica Molecular
12/09/2018	Métodos Semi-empíricos
19/09/2018	<b>Seminário 1</b>
26/09/2018	Discussão dos seminários/ Prática
03/10/2018	<b>Prova 1</b>
10/10/2018	Química Quântica
17/10/2018	Química Quântica
24/10/2018	Química Quântica
31/10/2018	<b>Prova 2</b>
07/11/2018	Métodos de Hartree Fock /Métodos pós Hartree Fock
14/11/2018	Teoria do funcional de densidade
21/11/2018	<b>Seminário 2</b>
28/11/2018	Discussão dos seminários/ Prática
05/12/2018	<b>Prova 3</b>

12/12/2018	Entrega de resultados
19/12/2018	Exame especial

#### TIPOS DE EXAME ESPECIAL:

Com base na Resolução CEPE nº 2880, o Exame Especial será de dois tipos:

**Exame Especial Total (EET):** aqueles alunos que estiverem presentes em todas as avaliações, apresentarem 75% de frequência nas aulas, e tiverem média inferior a 6,0 pontos, farão, obrigatoriamente, o EET.

**Exame Especial Parcial (EEP):** Os alunos com frequência mínima de 75% nas aulas, média inferior a 6,0 pontos, e que tiverem se ausentado em até 50% das avaliações parciais, poderão optar em substituir a(s) nota(s) da(s) prova(s) que se ausentaram. Nesse caso, o aluno não tem direito a fazer o EET. A escolha entre fazer o EET ou o EEP deve ser comunicado ao docente até dois dias antes da data do Exame Especial. Caso o aluno não avise qual o tipo de Exame escolheu, obrigatoriamente, fará o EET.

Os alunos que se ausentarem em mais de 50% das avaliações, farão, obrigatoriamente, o EET.

#### 5 – BIBLIOGRAFIA:

MORGON, Nelson H; COUTINHO, Kaline **Métodos de Química Teórica e Modelagem Molecular**. São Paulo: Ed Livraria da Física, 2007.

LEVINE, I.N. **Química Cúantica**, 5a edição, Madrid, 2001.

MONTANARI, C.A. **Química medicinal: Métodos e fundamentos em planejamento de fármacos**. São Paulo: Editora da Universidade de São Paulo, 2011.