



Curso: <b>Programa de Pós-Graduação em Tecnologias Sustentáveis (Mestrado profissional)</b>	
Unidade Curricular: <b>MODELAGEM MOLECULAR</b>	
Professor(es): <b>Arlan da Silva Gonçalves</b>	
Período Letivo: 1º período	Carga Horária: <b>45 h</b>
<b>OBJETIVOS</b>	
<b>Geral:</b>  Elucidar através de métodos teóricos e de modelagem molecular estruturas moleculares, além das propriedades estruturais e eletrônica que se correlacionem com os padrões experimentais.  <b>Específicos:</b> <ul style="list-style-type: none"><li>– Otimizar estruturas moleculares;</li><li>– Descrever as interações inter e intra-moleculares;</li><li>– Extrair, utilizando métodos semi-empíricos e ab initio, propriedades estruturais e eletrônicas de moléculas e potenciais nanomateriais;</li><li>– Analisar através de técnicas de docagem molecular, interações receptores (ex: nanomateriais) / ligantes;</li><li>– Estudar, através de simulações por dinâmica molecular, a evolução temporal das interações receptores/ligantes;</li><li>– Propor novos nanomateriais.</li></ul>	
<b>EMENTA</b>	
Otimização de geometria com a mecânica molecular. Análise conformacional. Métodos semi-empíricos nos cálculos de estrutura eletrônica. Métodos quânticos nos cálculos de estrutura eletrônica. Planejamento computacional de nanoligas, nanotubos e nanofármacos. Estudo das propriedades espectroscópicas e eletrônicas dos materiais. Estudo in silico de organometálicos. Mecanismos in silico de polimerização de materiais.	
<b>PRÉ-REQUISITO (SE HOVER)</b>	
Noções que Química Quântica.	
<b>CONTEÚDOS</b>	<b>CARGA HORÁRIA</b>
<b>UNIDADE I: Simulações por modelagem molecular: Fundamentos e aplicações</b>	3
<b>UNIDADE II: Métodos Clássicos x Métodos Semi-empíricos x Métodos Quânticos</b>	3
<b>UNIDADE III: Otimização de geometria (minimização de energia) e análise conformacional, usando a mecânica molecular</b>	3
<b>UNIDADE IV: Interações intermoleculares, utilizando a mecânica molecular</b>	3

UNIDADE V: Otimização de geometria e análise conformacional, usando métodos semi-empírico.	3
UNIDADE VI: O uso de métodos semi-empíricos para obtenção de propriedades físico-químicas e estruturais/eletrônicas	3
UNIDADE VII: O uso de métodos quânticos para obtenção de propriedades físico-químicas e estruturais/eletrônicas	3
UNIDADE VIII: Obtenção <i>in silico</i> da energia de adsorção e do calor de reação, utilizando métodos semi-empíricos	3
UNIDADE IX: Simulações <i>in silico</i> de mecanismos de reações	3
UNIDADE X: Espectroscopia no IV, UV e RMN, utilizando métodos semi-empíricos e quânticos	3
UNIDADE XI: Mecanismos <i>in silico</i> de estruturação/polimerização de moléculas	3
UNIDADE XII: Correlação teórico x experimental	3
UNIDADE XIII: Planejamento computacional de fármacos e nanomateriais (noções de docagem molecular)	3
UNIDADE XIV: Noções de Dinâmica Molecular	6
<b>Total</b>	<b>45</b>
<b>METODOLOGIA</b>	
São as estratégias de aprendizagem, técnicas e práticas que orientam a ação pedagógica nas aulas:	
<ul style="list-style-type: none"> <li>• Aulas expositivas interativas;</li> <li>• Estudos individuais e em grupo com análise de textos e artigos científicos;</li> <li>• Realização de seminários.</li> </ul>	
<b>RECURSOS</b>	
Livro texto; Sala de aula; Quadro branco e pincel; Laboratório de informática; Projetor multimídia; Sistema operacional Linux; Artigos científicos	
<b>AVALIAÇÃO DA APRENDIZAGEM</b>	
<b>Critérios</b> Será priorizada a produção discente, sobretudo a articulação entre o saber estudado e a solução de problemas que a realidade apresenta. Pontualidade e assiduidade nas aulas. Observação do desempenho individual e coletivo verificando se o aluno/equipe foi capaz de desenvolver habilidades e competências requeridas: trabalhar em equipe; liderar; debater, interagir; propor soluções; concentrar-se; solucionar problemas; apresentar-se e construir os projetos.	<b>Instrumentos</b> <ul style="list-style-type: none"> <li>– Trabalho;</li> <li>– Apresentação de artigos;</li> <li>– Seminário.</li> </ul>
<b>BIBLIOGRAFIA BÁSICA</b>	

- HEHRE, W. J. A Guide to Molecular Mechanics and Quantum Chemical Calculations. Wavefunction, Inc (2003).
- LEACH, A. R. Molecular modelling: principles and applications. 2a Ed. Essex,UK, Pearson Educated Limited. 744 p. ISBN 0-582-38210-6 (2001).
- MORGON, NELSON H. E KALINE COUTINHO. MÉTODOS DE QUÍMICA TEÓRICA E MODELAGEM MOLECULAR. Ed. **Livraria da física; 1ª. Ed. 2007.**

#### **BIBLIOGRAFIA COMPLEMENTAR**

- GONÇALVES, A. S. ESTUDO DA REATIVAÇÃO DA ACETILCOLINESTERASE HUMANA INIBIDA PELO ORGANOFOSFORADO TABUN ATRAVÉS DE MÉTODOS HÍBRIDOS CLÁSSICOS QUANTO-MECÂNICOS – TESE DE DOUTORADO (2009).
- SOLOMONS, T. W. G. QUÍMICA ORGÂNICA, 6A EDIÇÃO, VOLUME 2(1996).
- TRISIC, M.; PINTO, M. F. S. Química quântica: fundamentos e aplicações – Barueri, SP: Manole (2009).
- LEVINE, I. N. Quantum Chemistry, 6ª. ed. ISBN 13 978-0-13-613106-9 (2009).
- VAN GUNSTEREN, W. F., BILLETER, S. R., EISING, A. A., HÜNENBERGER, P. H., KRÜGER, P., MARK, A. E., SCOTT, W. R. P., TIRONI, I. G. Biomolecular Simulation: The GROMOS96 manual and user guide. Zürich, Switzerland: Hochschulverlag AG an der ETH Zürich (1996).