



Ministério da Educação
Instituto Federal do Espírito Santo
Campus Vitória

Curso: Programa de Pós-Graduação em Tecnologias Sustentáveis (Mestrado profissional)	
Unidade Curricular: MODELAGEM MOLECULAR	
Professor(es): Arlan da Silva Gonçalves	
Período Letivo: 1º período	Carga Horária: 45 h
OBJETIVOS	
Geral: Elucidar através de métodos teóricos e de modelagem molecular estruturas moleculares, além das propriedades estruturais e eletrônica que se correlacionem com os padrões experimentais. Específicos: <ul style="list-style-type: none">– Otimizar estruturas moleculares;– Descrever as interações inter e intra-moleculares;– Extrair, utilizando métodos semi-empíricos e ab initio, propriedades estruturais e eletrônicas de moléculas e potenciais nanomateriais;– Analisar através de técnicas de docagem molecular, interações receptores (ex: nanomateriais) / ligantes;– Estudar, através de simulações por dinâmica molecular, a evolução temporal das interações receptores/ligantes;– Propor novos nanomateriais.	
EMENTA	
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.	
PRÉ-REQUISITO (SE HOUVER)	
Noções que Química Quântica.	



Ministério da Educação
Instituto Federal do Espírito Santo
Campus Vitória

CONTEÚDOS	CARGA HORÁRIA
UNIDADE I: Simulações por modelagem molecular: Fundamentos e aplicações	3
UNIDADE II: Métodos Clássicos x Métodos Semi-empíricos x Métodos Quânticos	3
UNIDADE III: Otimização de geometria (minimização de energia) e análise conformacional, usando a mecânica molecular	3
UNIDADE IV: Interações intermoleculares, utilizando a mecânica molecular	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
Total	45
METODOLOGIA	



Ministério da Educação
Instituto Federal do Espírito Santo
Campus Vitória

São as estratégias de aprendizagem, técnicas e práticas que orientam a ação pedagógica nas aulas:

- Aulas expositivas interativas;
- Estudos individuais e em grupo com análise de textos e artigos científicos;
- Realização de seminários.

RECURSOS

Livro texto; Sala de aula; Quadro branco e pincel; Laboratório de informática; Projetor multimídia; Sistema operacional Linux; Artigos científicos

AValiação DA APRENDIZAGEM

Critérios

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.

Instrumentos

- Trabalho;
- Apresentação de artigos;
- Seminário.

BIBLIOGRAFIA BÁSICA

- 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).



Ministério da Educação
Instituto Federal do Espírito Santo
Campus Vitória

-MORGON, NELSON H. E KALINE COUTINHO. MÉTODOS DE QUÍMICA TEÓRICA E MODELAGEM MOLECULAR. Ed. Livraria da física; 1ª. Ed. 2007.

-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).

BIBLIOGRAFIA COMPLEMENTAR

-FIGUEIREDO, BARBARA SILVA ; DE SOUZA FERREIRA, JULYANA NOVAL ; VASCONCELOS, VANNYLA VIKTÓRIA VIANA ; RIBEIRO, JOSELITO NARDY ; GUIMARÃES, MARCO CESAR CUNEGUNDES ; da Silva Gonçalves, Arlan ; DA SILVA, ANDRÉ ROMERO . The interaction effects between macromolecules and photosensitizer on the ability of AlPc and InPc-loaded PHB magnetic nanoparticles in photooxidatizing simple biomolecules. INTERNATIONAL JOURNAL OF BIOLOGICAL MACROMOLECULES, v. 00, p. 01, 2022.

-GONÇALVES, A. S. ESTUDO DA REATIVAÇÃO DA ACETILCOLINESTERASE HUMANA INIBIDA PELO ORGANOFOSFORADO TABUN ATRAVÉS DE MÉTODOS HÍBRIDOS CLÁSSICOS QUANTO-MECÂNICOS – TESE DE DOUTORADO (2009).

-GONÇALVES, MATEUS A. ; Gonçalves, Arlan S. ; FRANCA, TANOS C. C. ; SANTANA, MOZARTE S. ; DA CUNHA, ELAINE F. F. ; Ramalho, Teodorico C. . Improved Protocol for the Selection of Structures from Molecular Dynamics of Organic Systems in Solution: The Value of Investigating Different Wavelet Families. Journal of Chemical Theory and Computation, v. 00, p. 01, 2022.

-LEVINE, I. N. Quantum Chemistry, 6ª. ed. ISBN 13 978-0-13-613106-9 (2009).

-SOLOMONS, T. W. G. QUÍMICA ORGÂNICA, 6A EDIÇÃO, VOLUME 2(1996).

-TRSIC, M.; PINTO, M. F. S. Química quântica: fundamentos e aplicações - Barueri, SP: Manole (2009).

-ULIANA, FABRICIO ; SILVA FILHO, ELOI ALVES ; GONÇALVES, Arlan da Silva ; DOS SANTOS, VADILSON MALAQUIAS ; ULIANA, MATEUS . FPolymer: A Program for 3D Structure Generation and OPLS Topology of Polymers with High Molecular Mass. ORBITAL: THE ELECTRONIC JOURNAL OF CHEMISTRY, v. 14, p. 58-62, 2022.