



MINISTÉRIO DA EDUCAÇÃO
SECRETARIA DE EDUCAÇÃO PROFISSIONAL E TECNOLÓGICA
IFPB – Campus Sousa
LICENCIATURA EM QUÍMICA

PLANO DE DISCIPLINA

IDENTIFICAÇÃO

CURSO: Licenciatura em Química

DISCIPLINA: **Química Computacional**

CÓDIGO DA DISCIPLINA:

PRÉ-REQUISITO: Não há

UNIDADE CURRICULAR: Obrigatória [X] Optativa [] Eletiva [] SEMESTRE: 04

CARGA HORÁRIA

TEÓRICA: 20 h/r

PRÁTICA: 30 h/r

EaD: 0 h/r

PCC¹: 0 h/r

CARGA HORÁRIA SEMANAL: 2,5 h/r

CARGA HORÁRIA TOTAL: 50 h/r

DOCENTE RESPONSÁVEL: Higo de Lima Bezerra Cavalcanti

EMENTA

Pacotes computacionais específicos para a química. Representações de moléculas, equações e reações utilizando o computador. Visualização de moléculas em 3 dimensões aplicados ao ensino da química. Pacotes computacionais gratuitos para a obtenção de informações químicas.

OBJETIVOS

Geral:

Dominar modernas ferramentas computacionais específicas da área da química na representação bidimensional e tridimensional de moléculas e reações. Aplicar pacotes computacionais de livre acesso para obter dados químicos anteriormente possíveis apenas em laboratório.

Específicos:

- Produzir textos, tabelas, quadros e figuras em nível acadêmico;
- Representar moléculas e reações químicas de diversas maneiras em pacotes computacionais apropriados;
- Utilizar pacotes computacionais apropriados para a visualização de moléculas em três dimensões;
- Aplicar programas específicos para obter dados químicos;
- Obter dados de propriedades geométricas e termodinâmicas através de métodos computacionais modernos;
- Estimar o transcorrer de uma reação química através de métodos computacionais;

CONTEÚDO PROGRAMÁTICO

1. Internet: um breve histórico. Ferramentas de busca acadêmica.
2. Revista Química Nova/Química Nova na Escola.
3. Introdução à química computacional: Mecânica molecular. Cálculos utilizando química quântica
4. Visualização e representação de estruturas químicas: pacotes computacionais para visualização em 2 e 3 dimensões.
5. Obtenção de dados químicos através de pacotes computacionais: Energia. Otimização de geometria. Frequências vibracionais. Termoquímica. Modelagem de reações químicas.

METODOLOGIA DE ENSINO

- Aulas expositivas e dialogadas utilizando recursos audiovisuais.
- Resolução de exercícios e trabalhos.
- Apresentação de seminários e discussões sobre artigos relevantes.
- Aulas práticas realizadas no Laboratório de Informática.

RECURSOS DIDÁTICOS

[X] Quadro

[X] Projetor

[X] Vídeos/DVDs

¹ PCC: Prática Pedagógica como Componente Curricular



MINISTÉRIO DA EDUCAÇÃO
SECRETARIA DE EDUCAÇÃO PROFISSIONAL E TECNOLÓGICA
IFPB – Campus Sousa
LICENCIATURA EM QUÍMICA

[X] Periódicos/Livros/Revistas/Links

[X] Equipamento de Som

[X] Laboratório de Informática

[X] Softwares: Chemdraw 16®, ChemSketch 2016, Gabedit, Chemissian, Hyperchem 8.0.10, MOPAC2016, GAMESS.

[] Outros:.

CRITÉRIOS DE AVALIAÇÃO

- Avaliações escritas e práticas;
- Trabalhos individuais e em grupo (listas de exercícios, pesquisas, seminários);
- O processo de avaliação é contínuo e cumulativo;
- O aluno que não atingir 70% do desempenho esperado fará Avaliação Final.
- O resultado final será composto do desempenho geral do aluno.

BIBLIOGRAFIA

Bibliografia Básica:

1. QUÍMICA NOVA. São Paulo: Sociedade Brasileira de Química, 1978-
2. QUÍMICA NOVA NA ESCOLA. São Paulo: Sociedade Brasileira de Química, 1995-
3. ATKINS, P. W., DE PAULA, J., **Físico-Química**. Vol. 1. 9. ed. Rio de Janeiro: LTC, 2010.

Bibliografia Complementar:

1. LEVINE, I. N., **Físico-Química**. Vol. 2. 6. ed. Rio de Janeiro: LTC, 2014.
2. BROWN, T., LEMAY, H. E., **Química: A ciência central**. 9. ed. New Jersey: Prentice Hall, 2005.
3. ATKINS, P. JONES, L. **Princípios de Química – Questionando a Vida Moderna e o Meio-ambiente**. 5. ed. São Paulo: Bookman, 2011.
4. JENSEN, F. **Introduction to Computational Chemistry**. 2. ed. Chichester-UK: John Wiley and Sons, 2007.
5. ATKINS, P.; DE PAULA, J.; FRIEDMAN, R. **Quanta, Matéria e Mudança: Uma Abordagem Molecular para a Físico-Química**. Vol. 1. 1. ed. Rio de Janeiro: LTC, 2011.

OBSERVAÇÕES