



UNIVERSIDADE FEDERAL DE PERNAMBUCO
PRÓ-REITORIA PARA ASSUNTOS ACADÊMICOS
DEPARTAMENTO DE DESENVOLVIMENTO DO ENSINO

PROGRAMA DE COMPONENTE CURRICULAR

TIPO DE COMPONENTE (Marque um X na opção)

<input checked="" type="checkbox"/>	Disciplina	<input type="checkbox"/>	Prática de Ensino
<input type="checkbox"/>	Atividade complementar	<input type="checkbox"/>	Módulo
<input type="checkbox"/>	Monografia	<input type="checkbox"/>	Trabalho de Graduação

STATUS DO COMPONENTE (Marque um X na opção)

<input type="checkbox"/> OBRIGATÓRIO	<input checked="" type="checkbox"/> ELETIVO	<input type="checkbox"/> OPTATIVO
--------------------------------------	---	-----------------------------------

DADOS DO COMPONENTE

Código	Nome	Carga Horária Semanal		Nº de Créditos	C. H. Global	Período
		Teórica	Prática			
QUIM0107	Introdução à Química Computacional	30		2	30	

Pré-requisitos	QUIM0076 Química Geral I	Co-Requisitos		Requisitos C.H.	
----------------	-----------------------------	---------------	--	-----------------	--

EMENTA

Introdução aos programas computacionais (softwares) para tratamento de dados, bases de dados, construção de moléculas, modelagem computacional, cálculos computacionais, simulação, tutoriais. Introdução aos sítios (sites) educacionais para o ensino de química.

OBJETIVO (S) DO COMPONENTE

Explorar os benefícios que a visualização e a manipulação de átomos virtualmente pode oferecer, de forma didática, para uma melhor compreensão dos conteúdos programáticos de sala de aula, visando um melhor

entendimento do comportamento e disposição espacial de uma determinada molécula. Também auxiliar no aproveitamento dos conteúdos abordados em diversas áreas da química, por exemplo: química orgânica (estereoquímica, reações orgânicas, reatividade, propriedades), química inorgânica (estrutura de compostos inorgânicos, simetria e teoria de grupo, propriedades, ligações químicas), físico-química (termodinâmica, teoria de orbitais moleculares, etc.).

METODOLOGIA

A dinâmica do componente curricular será desenvolvida por meio de aulas teóricas expositivas, utilizando quadro branco e Datashow, com discussão do conteúdo, resolução de exercícios e fazendo estudo de caso que envolvem várias áreas da química. Sendo também a dinâmica das aulas complementadas por consulta bibliográfica (básica e complementar, tais como livros, artigos científicos, etc.), por parte dos alunos, e discussão.

AVALIAÇÃO

O processo de avaliação da disciplina será realizado por meio de prova escrita, trabalho, desenvolvimento de projeto, apresentação de seminário, lista de exercício e frequência.

CONTEÚDO PROGRAMÁTICO

Introdução à química computacional: aplicações. Aplicações de Computadores em Química. Introdução à Programas Gráficos. Manipulação de dados. Ajuste de dados. Diferenciação e integração numéricas. Representação gráfica de moléculas: visualização, manipulação e determinação de parâmetros geométricos de moléculas. Determinação de parâmetros eletrônicos de moléculas. Aplicações. Estabilidade de conformeros. Utilização da densidade eletrônica e do potencial eletrostático na interpretação da reatividade química de moléculas 1/1. Utilização da densidade eletrônica e do potencial eletrostático na interpretação da reatividade química de moléculas 1/2. Obtenção de espectros vibracionais e atribuições dos modos normais vibracionais de moléculas simples.

BIBLIOGRAFIA BÁSICA

- SHRIVER, D. F.; ATKINS, P. W. **Química inorgânica**. Editora Bookman, 2008, 4ª edição.
- SOLOMONS, T. W. G.; FRYHLE, C. B. **Química orgânica**, v.2. Editora LTC, 2012, 10ª edição.
- ATKINS P.; JONES, L. **Princípios de Química- questionando a vida moderna e o meio ambiente**. Editora Bookman, 2012, 5ª edição.

BIBLIOGRAFIA COMPLEMENTAR

- FORESMAN, J.B.; FRISCH, Æ. **Exploring Chemistry with Electronic Structure Methods**. Editora Gaussian, 2º edition.
- CRAMER, C. J. **Essentials of Computacional Chemistry**. Editora Willey, 2002.
- LEACH, A. R. **Molecular Modelling. Principles and Applications**. Prentice Hall, 2001, 2º edition.
- RODRIGUES, M. R. M.; ALMEIDA, R. S.; SILVA, E. P.; CHAVES, D.C. **O uso de Ferramentas Computacionais no Ensino de Química: Estudo de Isomeria Geométrica no Ensino Médio**. 52º Congresso Brasileiro de Química, Outubro 2012.
- MORGON, N. H.; COUTINHO, K. **Métodos de Química Teórica e Modelagem Molecular**. Editora Livraria da Física, 2007.
- BEZERRA, A. F; LOPES, K. C.; ARAUJO, R. C. M. U. **Utilização da Química Computacional como Ferramenta de Auxílio no Aprendizado dos Conteúdos do Ensino Médio**. XVI ENEQ e X EDUQUI. Julho 2012.
- ATKINS, P. W.; DE PAULA, J. **Físico-química**, v.2. Editora LTC, 2012.
- RAUPP, D.; SERRANO, A.; MARTINS, T. L. C. **A evolução da química computacional e sua contribuição para a educação em Química**. Revista Liberato, Novo Hamburgo, vol. 9, n. 12, p. 13-22, jul./dez. 2008.
- MICHEL, R.; DOS SANTOS, F.M.T.; GRECA, I.M.L. **Uma busca na Internet por Ferramentas Para a Educação Química no Ensino Médio**. Química Nova na Escola, p. 3, nº 19, maio (2004).
- MARIANO, A.; VENTURA, E.; DO MONTE, S.A.; BRAGA, C. F.; CARVALHO, A. B.; ARAUJO, R. C. M. U. **O Ensino de Reações Orgânicas Usando Química Computacional: I. Reações de Adição Eletrofílica a Alquenos**. Quim. Nova, v. 31, nº. 5, 1243 (2008).
- Site do programa: Gaussian09 (<http://www.gaussian.com>).

DEPARTAMENTO A QUE PERTENCE O
COMPONENTE CURRICULAR

NÚCLEO DE FORMAÇÃO DO DOCENTE-CAA

Charlie Salvador Gonçalves

ASSINATURA DO CHEFE DO DEPARTAMENTO



Prof. Dr. Charlie Salvador Gonçalves
Coordenador
Universidade Federal de Pernambuco
Centro Acadêmico de Agreste - NFD
SIAPE: 1836312

HOMOLOGADO PELO COLEGIADO
DO CURSO

QUÍMICA-LICENCIATURA

Jane Maria Gonçalves Laranjeira

ASSINATURA DO COORDENADOR DO CURSO



Prof. Dra. Jane M. Gonçalves Laranjeira
Coord. Química - Licenciatura
UFPE - CAA - SIAPE: 1836364
Núcleo de Formação de Docentes



Emitido em 29/09/2023

EMENTA Nº 1400/2023 - SEGEC (12.33.89)

(Nº do Protocolo: NÃO PROTOCOLADO)

(Assinado digitalmente em 29/09/2023 18:09)

MARIA FABIANA DA SILVA COSTA

COORDENADOR - TITULAR

CGLQ NFD (12.33.26)

Matrícula: ###306#8

(Assinado digitalmente em 02/10/2023 20:13)

ROBERTO ARAUJO SA

COORDENADOR - SUBSTITUTO

CGLQ NFD (12.33.26)

Matrícula: ###153#6

Visualize o documento original em <http://sipac.ufpe.br/documentos/> informando seu número: **1400**, ano: **2023**, tipo:
EMENTA, data de emissão: **29/09/2023** e o código de verificação: **0b600bb481**