

UNIVERSIDADE FEDERAL DA PARAÍBA
CENTRO DE CIÊNCIAS EXATAS E DA NATUREZA
DEPARTAMENTO DE QUÍMICA

Componente Curricular: COMPUTAÇÃO PARA QUÍMICA

Carga Horária: 60 horas.

Numero de Créditos: 04

Pré-Requisitos: Nenhum

Público-alvo: Bacharelado e Licenciatura em Química.

OBJETIVOS Conhecer diversas ferramentas computacionais aplicadas à química

HABILIDADES E COMPETÊNCIAS Conhecer os itens de hardware de um microcomputador. Conhecer os sistemas operacionais Windows e Linux. Aprender a utilizar programas para edição de compostos e reações químicas. Aprender a utilizar editor de texto para elaborar artigos, relatórios e monografias. Saber utilizar processador de equações. Construir planilhas de cálculos numéricos e estatísticos. Realizar a construção de gráficos. Preparar apresentações em Slides. Desenvolver ambientes na internet. Adquirir noções de modelagem e simulação molecular.

EMENTA / PROGRAMA

Sistema de hardware de um microcomputador. Sistemas operacionais Windows e Linux. Editor de fórmulas e reações químicas. Editor de texto. Processador de equações. Planilhas de cálculos. Construção de gráficos. Apresentação em Slides. Criação de ambientes na internet. Modelagem e Simulação Molecular.

METODOLOGIA

Aulas expositivas, práticas e exercícios.

AValiação

Realização de exercícios, trabalhos, apresentação de seminários, provas escritas e participação nas aulas.

BIBLIOGRAFIA

1. ARAÚJO, J., Introdução ao Linux, Editora Ciência Moderna, 2000.
2. Manual do usuário Windows 2003.
3. Manual do usuário. Office 2000.
4. Origin Program -www.OriginLab.com
5. Manual do Programa Gaussview - Gaussview 2.1 – Gaussview, inc. <http://gaussian.com>
6. Manual do Programa HyperChem - HyperChem 7.0. Hypercube Inc., Gainesville, FL – USA (2002).
7. CHERYL BRUMBAUGH-DUNCAN - Flash MX: Criação e Desenvolvimento de Web Sites, Editora Futura, 2003.
8. JENSEN, F., *Introduction to Computational Chemistry*, John Wiley Sons: London, 2002.