

### UNIVERSIDADE FEDERAL DO AMAZONAS

# INSTITUTO DE CIÊNCIAS EXATAS DEPARTAMENTO DE QUÍMICA

2º Andar do Bloco 10, Secretaria do DQ, Setor Norte do Campus Universitário Sen. Arthur Virgílio Filho Av. Rodrigo Otávio, 6.200 – Coroado. 69077-000 - Manaus-AM. Fone/Fax (092) 33052870. E-mail: ccquimica@ufam.edu.br

## PROGRAMA

CODIGO	DISCIPLINA				
IEQ005	INFORMÁTICA APLICADA À QUÍMICA				
	CARGA HORÁRIA				
CRÉDITO	TIPO	TEÓRICA	PRÁTICA	TOTAL	
03.2.1	Teórica/Prática	30	30	60	
CURSO(S)		_			
OFERECIDO(S)		(	CÓDIGO(S)	CURRÍCULO(S)	
LICENCIATURA EM QUÍMICA - DIURNO			E12-LD	2005/1	
LICENCIATURA EM QUÍMICA - NOTURNO			E09-LN	2005/1	
PERÍODO	PRÉ-REQUISITO(S)				
02	IEC981				
02	IEC981				

#### **EMENTA**

Introdução à planilha EXCEL. Aquisição, análise e tratamento de dados. Simulação de problemas químicos. Métodos iterativos de soluções de equações não-lineares. Sistemas de equações lineares. Gráficos de funções lineares e não-lineares. Introdução a ajuste de curva não-linear.

#### **PROGRAMA**

Capítulo 1 - Introdução à Planilha EXCEL

- 1.1. Apresentação da interface gráfica;
- 1.2. Inserindo textos, números, fórmulas e objetos;
- 1.3. Tabulando os dados e plotando gráficos;
- 1.4. Realizando buscas de dados para simular problemas da Química.

Capítulo 2 - Aquisição, Análise e Tratamento de Dados

- 2.1. Coleta de dados experimentais;
- 2.2. Noções elementares para tratamento dos dados;
- 2.3. Representação gráfica dois resultados experimentais;
- 2.4. Métodos dos mínimos quadrados.

Capítulo 3 - Simulação de Problemas Químicos

- 3.1. Densidade de líquido;
- 3.2. Massa molecular de polímero;
- 3.3. Curva de calibração.

Capítulo 4 - Métodos Iterativos de Soluções de Equações Não-Lineares

- 4.1. Introdução, aproximação, erros e arredondamento;
- 4.2. 4.2. Métodos iterativos:
- (i) bissecção; (ii) secante; (iii) Newton-Raphson.

Capítulo 5 - Sistemas de Equações Lineares

- 5.1. Introdução aos sistemas de equação lineares;
- 5.2. Métodos de resolução de sistema lineares triangulares;
- 5.3. Métodos de eliminação de Gauss (método direto).

Capítulo 6 - Gráficos de Funções Lineares e Não-Lineares

- 6.1. Plotando gráficos de funções lineares e não-lineares;
- 6.2. Calculando a derivada primeira e segunda, plotando os respectivos gráficos e interpretação;
- 6.3. Calculando a integração de uma curva pelo método do trapézio.

Capítulo 7 – Introdução a Ajuste Não-Linear

- 7.1. Curvas gausssiana e lorentziana
- 7.2. Ajuste das curvas de forma forçada com as estimativas da largura e meia altura e área.

BIBLIOGRAFIA				
Apostila da planilha EXCEL.				
Artigos, literaturas e tutoriais fornecidos pelo professor.				
Manaus, 13 de janeiro de 2012.				
1.11.11.11.11.01.01.01.01.01.01.01.01.01	Rubrica			