

UNIVERSIDADE FEDERAL DO PARANÁ (UFPR)

Setor de Ciências Exatas Departamento de Química Disciplinas do Curso de Graduação

Disciplina: CQ058 – Tópicos especiais em Química II - “Desenvolvimento de softwares em Química”

Natureza: Semestral **Carga Horária:** 30h – **Teóricas:** 02 – **Práticas:** 00 – **Total:** 02 – **Créditos:** 02

Pré-requisito: Não tem **Co-Requisito:** Não tem

OBJETIVOS:

Apresentar noções de programação de computadores, utilizando-se a linguagem de programação BASIC e o compilador livre Free-BASIC, necessários para o desenvolvimento, pelos alunos, de softwares aplicados às diversas áreas da Química (Geral, Inorgânica, Orgânica, Físico-Química e Química Analítica). Espera-se que o desenvolvimento desses softwares possa servir como estímulo didático à compreensão de fenômenos físicos e químicos que são importantes nessas áreas da Química.

CONTEÚDO PROGRAMÁTICO:

1. Noções de programação de computadores:

- Introdução à linguagem de programação BASIC e ao compilador livre Free-BASIC..
- Apresentação da estrutura geral de um programa em FreeBASIC (programação procedural)
- Variáveis e tipos de dados
- Operadores: de atribuição, aritméticos, condicionais, lógicos, de indexação, de cadeias de caracteres, de iteração, precedência de operadores e tabelas verdade para operações
- Comandos de controle de fluxo: de ramificação e de laços
- Procedimentos: declaração de procedimentos e convenção para passagem de parâmetros por referência e por valor;
- Funções relativas a vetores e matrizes (“arrays”),
- Funções de entrada/saída de arquivos
- Funções matemáticas: algébricos, trigonométricos e outros;
- Funções do sistema operacional: arquivos e diretórios
- Funções de cadeias de caracteres (“strings”);
- Funções de entrada do usuário
- Referências da Biblioteca Gráfica: Funções de desenho 2D, entrada do usuário (mouse e teclado), funções da tela gráfica (modos de tela, páginas e métrica da tela)

2. Desenvolvimento de softwares aplicado à Química:

- Exemplos de programas desenvolvidos para aplicação em Química
- Desenvolvimento, pelos alunos, de software aplicado à Química, sob orientação do professor

AValiação:

- Prova escrita (será realizada após a finalização do conteúdo 1)
- Trabalho (desenvolvimento de softwares aplicados à Química): Será desenvolvido durante toda a disciplina; a ser entregue nos dias dos seminários
- Seminários: Serão realizados durante as duas últimas semanas de aulas.

BIBLIOGRAFIA:

EBERT, K.; EDERER, H.; ISENHOUR, T. L., *Computer Applications in Chemistry*, Weinheim, Germany: VCH, 1989.

VICTOR, A. e cols.; *FreeBASIC, A Free BASIC Compiler*, <http://www.freebasic.net>,
<http://sourceforge.net/projects/fbc/>, acessadas em Janeiro 2013.

DEBORD, J.; *FBMath; FreeBASIC Math Library*; <http://sourceforge.net/projects/fbmath>, acessada em Janeiro 2013.

NOVO, J. B. M.; DIAS Jr., L. C.; *Softwares livres e gratuitos*, <http://www.quimica.ufpr.br/jbm Novo/>, acessada em Janeiro de 2013

Outras referências: Livros e Periódicos de Química e áreas afins, disponíveis como bibliografia básica das disciplinas ministradas pelo DQUI/UFPR.

Curitiba, 20 de janeiro de 2013

Prof. Dr. João Batista Marques Novo jbm Novo@ufpr.br

www.quimica.ufpr.br/jbm Novo