

## QUI 2689 Química Computacional

CARGA HORÁRIA TOTAL: 03 hs semanais CRÉDITOS: 3

PRÉ-REQUISITO(S): -X-X-X-

---

<b>OBJETIVOS</b>	O objetivo desta disciplina é apresentar ao aluno de pós-graduação os aspectos de química computacional aplicados a problemas químicos de amplo interesse.
<b>EMENTA:</b>	Introdução à Mecânica Quântica, Equação de Schödinger, Estrutura Atômica, Estrutura Molecular, Método Hartree-Fock e pós-Hartree-Fock, Teoria do Funcional de Densidade, Método Semi-empírico, Mecânica Molecular e Dinâmica Molecular. Aplicações de ferramentas computacionais a problemas químicos.
<b>PROGRAMA</b>	Mecânica Molecular Dinâmica Molecular atomística Dinâmica Molecular Coarse Grained Mecânica Quântica Teoria do Funcional de Densidade Dinâmica Molecular Métodos Híbridos (QM/MM) Ancoragem Molecular Cálculos de Energia Livre Aplicações (Espectroscopias de Infravermelho, Ultravioleta, RMN, Orbitais atômicos, Orbitais Moleculares, Solvatação, Estado de Transição, Cinética Química, Mecanismos de reação, Planejamento de Fármacos, Nanotecnologia, Biofísica, modelos de membranas biológicas, filmes de Langmuir, etc.)
<b>AValiação</b>	Média = (P1 + P2 + P3) / 3 P1,P2,P3 = Avaliações (Trabalhos e/seminários)

**BIBLIOGRAFIA  
PRINCIPAL**

J. B. Foresman and Æ Frisch, *Exploring Chemistry with Electronic Structure Methods*, 3rd ed., Gaussian, Inc.: Wallingford, CT, 2015. ISBN: 978-1-935522-03-4

M.J. Abraham, D. van der Spoel, E. Lindahl, B. Hess, and the GROMACS development team, GROMACS User Manual version 2019, <http://www.gromacs.org>

LEACH, A. R. (2001). *Molecular modelling: principles and applications*. Harlow, England, Prentice Hall.

**BIBLIOGRAFIA  
COMPLEMENTAR**

**Physical Chemistry**

R. Stephen Berry, Stuart A. Rice, John Ross, Oxford University Press, 2nd ed., 2001;

**Physical Chemistry**

Julio de Paula, Peter Atkins, W. H. Freeman; 7th ed., 2001;

**Physical Chemistry**

Ira N Levine, McGraw-Hill Science/Engineering/Math; 5th ed., 2001;

**Quantum Mechanics Vol. 1**

Claude Cohen-Tannoudji, Bernard Diu, Franck Laloë, John Wiley and Sons, New York, 2006.

**Modern Quantum Chemistry: Introduction to Advanced Electronic Structure Theory**

Attila Szabo and Neil S. Ostlund, Dover, New York, 1996.