

SEI/UFU - 2829137 - Ficha de Componente Curricular



Ficha de Componente Curricular

CÓDIGO:		COMPONENTE CURRICULAR:	
PQ112		Química Computacional	
UNIDADE ACADÊMICA OFERTANTE:		SIGLA:	
Programa de Pós-Graduação em Química		PPGQUI	
CH TOTAL TEÓRICA:	CH TOTAL PRÁTICA:	CH TOTAL:	
60 horas	0	60 horas	
CATEGORIA:	CURSO(S):		
Optativa	Mestrado e Doutorado		

OBJETIVOS

Revisar os fundamentos de mecânica clássica e quântica, e aplicar essas teorias na descrição de interações envolvendo sistemas moleculares, utilizando ferramentas computacionais.

Ementa

Introdução à Química Computacional; Mecânica molecular; Busca conformacional e otimização de estrutura molecular 4; Aplicação da Termodinâmica Estatística; Simulações de Dinâmica Molecular; Simulações de Monte Carlo; Métodos para cálculos de estrutura eletrônica;

Modelos de solvatação implícita; Modelos de solvatação explícita; Métodos híbridos clássicos/quânticos (QM/MM).

PROGRAMA

1. Revisão da mecânica clássica.
2. Mecânica Molecular: Fundamentos, Funções de energia potenciais, campos de força.
3. Mecânica Molecular: Otimização de geometrias e busca conformacional.
4. Prática: Parametrização de campos de força e validação.
5. Superfície de energia potencial molecular.
6. Aplicação da Termodinâmica Estatística.
7. Simulações de Dinâmica Molecular.
8. Prática: Busca conformacional utilizando Dinâmica Molecular.
9. Simulações de Monte Carlo.
10. Prática: Desenvolvimento de um software em Monte Carlo e análises conformacionais.
11. Cálculo da estrutura eletrônica: Modelos semi-empíricos, Ab Initio, DFT e de correlação eletrônica.
12. Modelos de solvatação implícita.
13. Prática: Cálculo da estrutura eletrônica usando modelos de solvatação.
14. Modelos de solvatação explícita.
15. Métodos híbridos clássicos/quânticos (QM/MM).

16. Cálculos QM/MM incluindo solvente explícito.

BIBLIOGRAFIA BÁSICA

1. ATKINS, P. W. Físico-química. 9a. ed. Rio de Janeiro: LTC, vol. 2, 2012.
2. CRAMER, C. J. Essentials of Computational Chemistry. 2a ed. Wiley, USA, 2004.
3. HINCHLIFE, A. Molecular Modelling for Beginners. 2a ed. Wiley, UK, 2008.
4. JENSEN, F. Introduction to Computational Chemistry. 2a ed. Wiley, Denmark, 2007.
5. LEVINE, I. N. Quantum Chemistry. 4a ed. Prentice Hall, USA, 1991.
6. LEVINE, I. N. Quantum Chemistry. 5a ed. Prentice Hall, USA, 2000.
7. MORGON, N.H.; COUTINHO, K. Métodos de Química Teórica e Modelagem Molecular. São Paulo: Livraria da Física Editora, 2007.

BIBLIOGRAFIA COMPLEMENTAR

1. BOAS, M. L. Mathematical Methods in the Physical Sciences. Hoboken: John Wiley & Sons, 2006.
2. CALLEN, H. B. Thermodynamics and introduction to thermostatics. 2a. ed. New York: John Wiley & Sons, 1985.
3. REIF, F. Fundamentals of Statistical and Thermal Physics, International Edition, Singapore: McGraw-Hill Book Co, 1985.
4. SALINAS, S.R. A. Introdução a Física Estatística, São Paulo: EDUSP, vol.9, 1997.
5. TOLMAN, R. C. The principles of statistical mechanics. Oxford: The


Clarendon, 1938.


6. TUCKERMAN, M. E. Statistical Mechanics: Theory and molecular simulation. New York: Oxford University Press, 2010.

7. Artigos da literatura recentes sobre química computacional, química teórica ou modelagem molecular.

aprovação

Rodrigo Alejandro Abarza Muñoz Coordenador do PPGQUI	Fábio Augusto do Amaral Diretor do IQUFU
---	---

	Documento assinado eletronicamente por Rodrigo Alejandro Abarza Muñoz, Coordenador(a) , em 02/07/2021, às 15:30, conforme horário oficial de Brasília, com fundamento no art. 6º, § 1º, do Decreto nº 8.539, de 8 de outubro de 2015 .
---	---

	A autenticidade deste documento pode ser conferida no site https://www.sei.ufu.br/sei/controlador_externo.php?acao=documento_conferir&id_orgao_acesso_externo=0 , informando o código verificador 2829137 e o código CRC A5BF8B21 .
---	--

Referência: Processo nº 23117.036831/2021-41	SEI nº 2829137
--	----------------