



TEQ XII - Molelos Clássicos e Quânticos em Química Computacional

Código: PQ516C

Pré-requisitos:
Co-requisito:

Horas Aulas/Semana: PRÁTICA: 1 TEÓRICA: 3

Créditos: 4

Responsável: Prof. Eduardo de Faria Franca

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

Ementa:

- 1 – Introdução à Química Computacional
- 2 – Mecânica molecular
- 3 – Busca conformacional e otimização de estrutura molecular
- 4 – Introdução à Termodinâmica Estatística
- 5 – Simulações de Dinâmica Molecular
- 6 – Simulações de Monte Carlo
- 7 – Métodos para cálculos de estrutura eletrônica
- 8 – Modelos de solvatação implícita
- 9 – Modelos de solvatação explícita
- 10 – Métodos híbridos clássicos/quânticos (QM/MM)

Programa:

Semana Assunto

- 1 Apresentação da disciplina, das formas de avaliação e 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 Introdução à Termodinâmica Estatística
- 7 Introdução à Termodinâmica Estatística
- 8 Simulações de Dinâmica Molecular
- 9 **Prática:** Busca conformacional utilizando Dinâmica Molecular
- 10 Simulações de Monte Carlo
- 11 **Prática:** Desenvolvimento de um software em Monte Carlo e análises conformacionais
- 12 Cálculo da estrutura eletrônica: Modelo de Hartree-Fock e LCAO
- 13 Cálculo da estrutura eletrônica: Modelos semi-empíricos, *Ab Initio*, DFT e de correlação eletrônica



- | | |
|----|--|
| 14 | Modelos de solvatação implícita |
| 15 | Prática: Cálculo da estrutura eletrônica usando modelos de solvatação |
| 16 | Modelos de solvatação explícita |
| 17 | Métodos híbridos clássicos/quânticos (QM/MM) |
| 18 | Cálculos QM/MM incluindo solvente explícito / Conclusão da disciplina. |

Avaliações: Seminários, Trabalhos e provas práticas.

Bibliografia:

1. MORGON, N.H.; COUTINHO, K *Métodos de Química Teórica e Modelagem Molecular*, (Ed.) Livraria da Física Editora, São Paulo, 2007.
2. CRAMER, C. J. *Essentials of Computational Chemistry*, 2^a ed., Wiley, USA, 2004.
3. JENSEN, F. *Introduction to Computational Chemistry*, 2^a ed., Wiley, Denmark, 2007.
4. HINCHLIFE, A. *Molecular Modelling for Beginners*, 2^a ed., Wiley, UK, 2008.
5. LEVINE, I. N. *Quantum Chemistry*, 5^a ed., Prentice Hall, USA, 2000.
6. LEVINE, I. N. *Quantum Chemistry*, 4^a ed., Prentice Hall, USA, 1991.
7. Artigos da literatura recentes sobre química computacional, química teórica ou modelagem molecular.