

SÚMULA DA DISCIPLINA

1. Identificação

Código e nome da disciplina: QUP 153 – Química Computacional Avançada

Professor responsável: Paulo Fernando Bruno Gonçalves

Nível: Mestrado e Doutorado

Carga horária: 45 h

Créditos: 3 (três)

Revisado e atualizado em: Outubro_2020

2. Ementa

Abordagem dos principais métodos envolvendo Química Quântica

3. Objetivo

Aprimorar o conhecimento do aluno nas práticas de química computacional, tendo como requisito básico, o conhecimento prévio de química computacional básica na graduação, química quântica, e, preferivelmente, Métodos de Estrutura Eletrônica de Moléculas

4. Conteúdo Programático

- Princípios de Estrutura e Propriedades das Moléculas
- Introdução aos Métodos Semi-empíricos
- Princípios de Análise Conformacional e Vibracional
- Métodos *Ab Initio*
- Comparação entre Metodologias
- DFT: Comparação entre Funcionais
- Comparação Entre Distribuição de Cargas
- Cálculos DFT considerando Efeito de Solvente
- Espectroscopia
- Superfície de Potencial Eletrostático e Orbitais
- Estudo de casos: Mecanismos de Reação, Complexos, Sistemas Periódicos, Reatividade Química, Aromaticidade e Estados Excitados

5. Avaliação

Avaliação dos Exercícios Propostos

6. Método de Trabalho/Ensino

Aulas teórico-expositivas e EAD.

7. Bibliografia

- A. Leach, Molecular modelling: principles and applications. Prentice Hall, 2001.
- C. Cramer, Essentials of computational chemistry. New York: John Wiley, 2004.
- F. Jensen, Introduction to computational chemistry. San Francisco: John Wiley, 1999.
- J. M. Thijssen, Computational Physics, Cambridge Univ. Press. 2003.