



GOVERNO DO ESTADO DO PIAUÍ
UNIVERSIDADE ESTADUAL DO PIAUÍ – UESPI
CENTRO DE CIÊNCIAS NATURAIS - CCN
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM QUÍMICA – PPGQ



PROGRAMA DE DISCIPLINA

DISCIPLINA: Fundamentos de Química Computacional

MINISTRANTE:

| OBRIGATORIA | CRÉDITOS | SIGLA | CARGA HORÁRIA | ANO / SEMESTER |
|-------------|----------|-------|---------------|----------------|
| NÃO | 4 | | 60 hs | |

EMENTA:

Mecânica quântica: função onda e equação de Schrödinger, átomo de hidrogênio, determinante de Slater, átomos multi-eletrônicos. Métodos Hartree-Fock: RHF e UHF e ROHF. Teoria dos Orbitais moleculares: funções de base, equações de Hartree-Fock-Roothaan, erro de superposição de conjunto de base. Métodos semiempíricos: Aproximações ZDO, CNDO, INDO e NDDO, hamiltonianos AM1, PM3, PM6 etc. Mecânica molecular: Princípios, Campos de força empíricos (UFF, AMBER, MM+) vantagens e limitações. Cálculo de propriedades moleculares: construção e otimização de geometrias moleculares, simulação de espectros de infravermelho e RMN, superfícies de energia potencial (SEP), parâmetros termodinâmicos, potenciais eletrostáticos etc.

BIBLIOGRAFIA:

1. Morgon, N.H.; Coutinho, K. (Eds.) Métodos de Química Teórica e Modelagem Molecular. Editora Livraria da Física, 2007.
2. Leach, A.R. Molecular Modelling-Principles and Applications. Prentice Hall, 2001.
3. Jensen, F. Introduction to Computational Chemistry, 2.ed. John Wiley & Sons, 2007.
4. Jensen, J.H. Molecular Modeling Basics. CRC Press, 2010.
5. Young, David C. Computational Chemistry: A Practical Guide for Applying Techniques to Real-World Problems. John Wiley & Sons, 2001.
6. Cramer, C.J. Essentials of Computational Chemistry: Theories and Models. John Wiley & Sons, 2002.
7. Levine, I.N. Quantum Chemistry. 7.ed. Englewood Cliffs, Prentice Hall, 2013.
8. Foresman, J.B.; Frisch, A. Exploring Chemistry with Electronic Structure Methods: A Guide to Using Gaussian, Gaussian Inc.1993.
9. . Referências de Periódicos especializados.