



PROGRAMAS E BIBLIOGRAFIAS

Disciplina	
Código	Nome
QF852	Modelagem Molecular

Vetor
OF:S-5 T:002 P:000 L:000 O:000 D:000 HS:002 SL:002 C:002 AV:N EX:S FM:75%

Pré-Req	Não há
----------------	--------

Ementa
Introdução aos métodos de simulação computacional; descrição de modelos atômicos e moleculares; reatividade química; sistemas biológicos; sólidos e materiais.

Programa
A. Introdução à química computacional Modelos atômicos e moleculares (métodos <i>ab initio</i> , semiempíricos e da DFT) . Propriedades eletrônicas e moleculares. Aplicações.
B. Sistemas biológicos Campos de força. Simulações de dinâmica molecular. Aplicações.
C. Sólidos e materiais A química computacional na Nanociência. A revolução da Teoria do Funcional da Densidade. Aplicações.

Bibliografia
[1] Métodos De Química Teórica E Modelagem Molecular Autores: Nelson Morgon e Kaline Coutinho (Orgs) Editora Livraria da Física, 2007
[2] Molecular Modelling – Principles and Applications Autor: Andrew R. Leach Ed. Prentice Hall, 2001
[3] Introduction to Computational Chemistry Autor: Frank Jensen Ed. Wiley, 1999
[4] Molecular Modeling Basics Autor: Frank Jensen Ed. CRC Press, 2010
Outras referências a serem apresentadas durante a evolução da disciplina e específicas de cada bloco.

Critérios de Avaliação

Critérios de avaliação definidos pelo Professor, com base no disposto na Seção I – Normas Gerais, Capítulo V – Da Avaliação do Aluno na Disciplina, do Regimento Geral de Graduação. Frequência: 75 % (* O abono de faltas será considerado dentro do previsto no capítulo VI, seção X, artigo 72 do Regimento Geral de Graduação)