

Código: <b>QF852</b>								
Nome: <b>Modelagem Molecular</b>								
Nome em Inglês: <b>Molecular Modelling</b>								
Nome em Espanhol: <b>Modelización Molecular</b>								
Tipo de Disciplina: <b>Semanal</b>								
Tipo de Aprovação: <b>Nota e Frequência</b>								
Característica: <b>Regular</b>								
Frequência: <b>75%</b>								
Tipo de Período / Período de Oferecimento: <b>Semestral / Todos os períodos</b>								
Exige Exame: <b>Sim</b>								
Vetores								
T	L	P	O	PE	OE	SL	SEMANAS	CRÉDITO
<b>2</b>	-	-	-	-	-	<b>2</b>	<b>15</b>	<b>2</b>
Ocorrência nos Currículos:								
Pré-requisitos:								
Ementa: <b>Introdução aos métodos de simulação computacional; descrição de modelos atômicos e moleculares; reatividade química; sistemas biológicos; sólidos e materiais.</b>								
<p>Programa:</p> <p>A. Introdução à química computacional Modelos atômicos e moleculares (métodos ab initio, semiempíricos e da DFT) . Propriedades eletrônicas e moleculares. Aplicações.</p> <p>B. Sistemas biológicos Campos de força. Simulações de dinâmica molecular. Aplicações.</p> <p>C. Sólidos e materiais A química computacional na Nanociência. A revolução da Teoria do Funcional da Densidade. Aplicações.</p>								
<b>Bibliografia Básica</b>								
1) MORGON, N.; COUTINHO, K. <b>Métodos De Química Teórica E Modelagem Molecular</b> 1 Ed. São Paulo: Livraria da Física, 2007. 539 p.								
2) LEACH, A.R. <b>Molecular Modelling – Principles and Applications</b> 2 Ed. Harlow: Prentice Hall, 2001. 744 p.								
3) JENSEN, F. <b>Introduction to Computational Chemistry</b> 1 Ed. Chichester: Wiley, 1999. 429 p.								
<b>Bibliografia Complementar</b>								
1) JENSEN, F. <b>Molecular Modeling Basics</b> 1 Ed. Boca Raton: CRC Press, 2010. 166 p.								
2) ROGERS, D.W. <b>Computational Chemistry using the PC</b> 3 Ed. Hoboken: John Wiley & Sons, 2003. 349 p.								
3) FRENKEL, D.; SMIT, B. <b>Understanding Molecular Simulation.</b> 1 Ed. San Diego: Academic Press, 1996. 443 p.								
4) LEWARS, E. <b>Computational Chemistry. Introduction to the Theory and Applications of Molecular and Quantum Mechanics.</b> 1 Ed. Norwell: Kluwer Academic Publishers, 2003. 471 p.								
5) CRAMER, C.J. <b>Essentials of Computational Chemistry.</b> 2 Ed. Chichester: Wiley, 2004. 596 p.								