

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