



UNIVERSIDADE FEDERAL DO PARÁ
INSTITUTO DE CIÊNCIAS EXATAS E NATURAIS
PROGRAMA DE PÓS – GRADUAÇÃO EM QUÍMICA



SÚMULA DA DISCIPLINA DO PPGQ/UFPA

DISCIPLINA: **INTRODUÇÃO À MODELAGEM MOLECULAR** (disciplina eletiva)

a) Código da disciplina: PPGQI0118

b) Carga Horária: 60h

c) Créditos: 4

d) **Ementa:** a) Introdução a Pacotes para Química Computacional: Definições de Termos; Tipos de Pacotes Computacionais; Hardware e Software. b) Modelagem Molecular; Mecânica Molecular e Mecânica Quântica: Histórico e Fundamentos; Estratégias de Parametrização; Otimização de Geometria; Campos de Forças. c) Orbitais Atômicos e Moleculares. d) Estrutura Molecular e Eletrônica: Fundamentos da Teoria do Orbital Molecular; Implementações de Métodos Semi-Empíricos e Ab Initio. Superfície de Energia Potencial e Reações Químicas: Aproximação de Born-Oppenheimer; Propriedades Termodinâmicas e Cinéticas; Distribuição de Cargas; Propriedades Espectroscópicas; e) Efeitos de Solvatação: Efeitos da Fase Condensada na Estrutura e Reatividade; Interações Eletrostáticas; Modelos de Solvatação Implícita e Explícita; Ciclos Termodinâmicos.

e) **Bibliografia**

I - **Básica**

1) CRAMER, C. J. **Essentials of computational chemistry: theories and models**. John Wiley & Sons Ltd, 2nd ed. 2004.

2) MORGON, N. H. e COUTINHO, K. R. **Métodos de química teórica e modelagem molecular**. Editora Livraria da Física, São Paulo, 2007.

3) FILATOV, M.; CHOI, C.H.; OLIVUCCI, M. **New Horizons in Computational Chemistry Software** (Topics in Current Chemistry Collections), Springer, 2022.

Programa de Pós – Graduação em Química (PPGQ-ICEN/UFPA)

Endereço: Rua Augusto Corrêa, 01 – Campus Universitário Básico do Guamá
Belém - Pará – Brasil – CEP: 66.075 - 110

4) LIPKOWITZ, K.; PARRILL, A. L. **Reviews in computational chemistry**. Wiley & Sons Ltd, 2019.

II - Complementar

1) FIELD, M. J. A **Practical Introduction to the Simulation of Molecular Systems**. Cambridge University Press, 2nd ed. 2007.

2) HINCHLIFFE, A. **Modelling Molecular Structures**. John Wiley & Sons Ltd, 2nd ed. 2000.

3) UL-HAQ, Z.; WILSON A. K. **Frontiers in Computational Chemistry**. Bentham Science Publishers, 2020.