



Plano de ensino 2023/2

Nome do Curso: Ciências Moleculares

Nome da Disciplina: Química Computacional Avançada

Ano / Período: 2023/2

Nome Professor (a): Valter Henrique Carvalho Silva

Homepage: www.vhcsgroup.com

Código:	Horas-aula/ Semana: 4	Horas-aula prática: 0	Horas-aula teórica: 60	C H anual/semestral: 60
---------	--------------------------	--------------------------	---------------------------	----------------------------

### 1. Ementa

Softwares para Cálculos de Estrutura Eletrônica e Dinâmica Molecular Ab Initio. Submissão de Cálculos em Ambiente Linux. Modelos Computacionais e Modelos Químicos. Minimização de Energia. Otimização de Geometrias. Obtenção de Propriedades Moleculares. Cálculos de Frequências Vibracionais. Seleção de Métodos de Estrutura Eletrônica Apropriados. Reações Químicas e Reatividade. Modelando Estados Excitados. Cálculo de Propriedades com Solvente Explícito. Desenvolvimento de Pseudopotenciais. Avaliação de Trajetórias Reativas e não-Reativas via Dinâmica Molecular Ab Initio. Estudos de Processos Reativos via Metadinâmica. Estudos de Processos Reativos via Integrais de Trajetória.

### 2. Objetivos

#### Geral:

Introdução aos métodos empregados atualmente na química computacional. Descrição de várias técnicas e aplicação em moléculas simples, agregados moleculares e reações químicas. Familiarização com softwares modernos e seu emprego na solução de problemas práticos da química.

### 3. Conteúdos/Cronograma das atividades

DISCIPLINA: Química Computacional Avançada		DOCENTE: Valter Henrique Carvalho Silva	PERÍODO: 2023/2
Semana	Data	DESCRIÇÃO DO CONTEÚDOS/ATIVIDADES	
1.	10-08	Apresentação do Plano de Ensino	
2.	17-08	Softwares para Cálculos de Estrutura Eletrônica e Dinâmica Molecular Ab Initio. Submissão de Cálculos em Ambiente Windows e Linux.	
3.	24-08	Modelos Computacionais e Modelos Químicos. Minimização de Energia.	
4.	31-08	Modelos Computacionais e Modelos Químicos. Minimização de Energia.	
5.	14-09	Otimização de Geometrias. Obtenção de Propriedades Moleculares	
6.	21-09	Otimização de Geometrias. Obtenção de Propriedades Moleculares	
7.	28-09	Cálculos de Frequências Vibracionais. Seleção de Métodos de Estrutura Eletrônica Apropriados	
8.	05-10	Aplicação de Scripts para Obtenção de Propriedades Moleculares	



9.	19-10	Reações Químicas e Reatividade.
10.	26-10	Reações Químicas e Reatividade.
<b>11.</b>	<b>09-11</b>	<b>Entrega 1VA.</b>
12.	16-11	Avaliação de Trajetórias Reativas e não-Reativas via Dinâmica Molecular Ab Initio
13.	23-11	Avaliação de Trajetórias Reativas e não-Reativas via Dinâmica Molecular Ab Initio
14.	07-12	Estudos de Processos Reativos via Metadinâmica
<b>15.</b>	<b>14-12</b>	<b>Entrega 2VA.</b>

---

#### 4. Estratégias de ensino-aprendizagem, procedimentos e recursos didáticos

---

Aulas expositivas, seminários, estudos dirigidos e aulas demonstrativas. Recurso didático: retroprojeto, computador, quadro negro, giz, apagador e simulações computacionais.

Utilização do código computacional: Transitivity v.1.0.2

---

#### 5. Métodos e instrumentos avaliativos

A nota final do aluno será dada pela fórmula

N1 → Apresentação de artigo (qualis  $\geq$  A1 na Química) abordando tópicos de Química Computacional.

N2 → Análise de um sistema molecular utilizando técnicas de Química Computacional.

PS → Presença na disciplina.

$$NF = \frac{(0,30 * PS + 0,7 * N1) + (0,30 * PS + 0,7 * N2)}{2}$$

Se  $NF \geq 6,0$ , então, aluno(a) aprovado(a). Se não, aluno(a) reprovado(a).

---

#### 6. Prática como componente curricular – Registrar como será desenvolvida

Aulas expositivas, seminários, estudos dirigidos e aulas demonstrativas. Recurso didático: retroprojeto, computador, quadro negro, giz, apagador e simulações Computacionais

#### 7. Bibliografia

1. FORESMAN, J. B., FRISCH, A. Exploring Chemistry With Electronic Structure Methods. Gaussian, Inc. 2014.



2. MARX, D., HUTTER, J. Ab Initio Molecular Dynamics: Basic Theory and Advanced Methods. Cambridge. 2009.
3. BARDUCCIA., BONOMI, M.,PARRINELLO, M. Metadynamics. Wiley Interdisciplinary Reviews: Computational Molecular Science. 1, 826-843, 2011.
4. VIANNA, J. D. M. , FAZZIO, A. e CANUTO S. Teoria Quântica de Moléculas e Sólidos. Editora Livraria da Física, 2004.
5. MORGON, N. H.; COUTINHO, K. Métodos de Química Teórica e Modelagem Molecular. São Paulo; Livraria da Física Ed. 2007. 539 p.
6. LEACH, A. R.; Molecular Modelling: Principles and applications. 2a ED. Pearson Education Limited, 2001.
7. Cramer, C. J., Essentials of Computational Chemistry: Theories and Models. John-Wiley: Chichester, 2002.
8. Lewars, E., Computational Chemistry: Introduction to Theory and Applications of Molecular and Quantum Mechanics. Kluwer Academic: New York, 2004.