



Plano de ensino 2017/1

Nome do Curso: Química Industrial

Nome da Disciplina: Tecnologia em Modelagem Molecular	Ano/Período: 2017/1
-------------------------------------------------------	---------------------

Nome Professor (a): Valter Henrique Carvalho Silva (fatioleg.wixsite.com/vhcs)

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. Avaliação de Trajetórias Reativas e não-Reativas via Dinâmica Molecular Ab Initio.

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: Tecnologia em Modelagem Molecular		DOCENTE: Valter Henrique Carvalho Silva	PERÍODO: 2017/1
Semana	Data	DESCRIÇÃO DO CONTEÚDOS/ATIVIDADES	
1.	16/02	Apresentação do Plano de Ensino	
2.	23/02	Softwares para Cálculos de Estrutura Eletrônica e Dinâmica Molecular <i>Ab Initio</i> . Submissão de Cálculos em Ambiente Windows.	
3.	02/03	Modelos Computacionais e Modelos Químicos. Minimização de Energia.	
4.	09/03	Otimização de Geometrias. Obtenção de Propriedades Moleculares	
5.	16/03	Obtenção de Propriedades Moleculares	
6.	23/03	Cálculos de Frequências Vibracionais. Seleção de Métodos de Estrutura Eletrônica Apropriados	
7.	30/03	Entrega 1VA.	
8.	06/04	Reações Químicas e Reatividade. Superfície de Energia Potencial	
9.	20/04	Reações Químicas e Reatividade. Estado de Transição	



10.	27/04	Reações Químicas e Reatividade. Estado de Transição
11.	04/05	Avaliação de Trajetórias Reativas e não-Reativas via Dinâmica Molecular Ab Iníto
12.	11/05	Avaliação de Trajetórias Reativas e não-Reativas via Dinâmica Molecular Ab Iníto
13.	01/06	Discussão sobre um Artigo de Química Teórica e Computacional
14.	08/06	Entrega 2VA.
15.	22/06	Discussão das Atividades de 2VA

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

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

5. Métodos e instrumentos avaliativos

A nota final do aluno será dada pela fórmula

N1 → Construção e Cálculos de um Sistema Molecular com Aplicação Tecnológica e Farmacológica.

N2 → Estudo de um processo Reativo via Teoria do Estado de Transição.

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: retroprojetor, 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. BARDUCCI, A., 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.