



Plano de ensino 2019/2

Nome do Curso: Ciências Moleculares

Nome da Disciplina: Química Computacional Avançada

Ano / Período: 2019/2

Nome Professor (a): Valter Henrique Carvalho Silva

Homepage: www.vhcsgroup.com

|         |                          |                          |                           |                            |
|---------|--------------------------|--------------------------|---------------------------|----------------------------|
| Código: | Horas-aula/ Semana:<br>4 | Horas-aula prática:<br>0 | Horas-aula teórica:<br>60 | C H anual/semestral:<br>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: 2019/2 |
|--|-------|--|-----------------|
| Semana                                     | Data  | DESCRIÇÃO DO CONTEÚDOS/ATIVIDADES  |                 |
| 1.   | 14-08 | Apresentação do Plano de Ensino  |                 |
| 2.   | 21-08 | Softwares para Cálculos de Estrutura Eletrônica e Dinâmica Molecular Ab Initio. Submissão de Cálculos em Ambiente Windows e Linux. |                 |
| 3.   | 28-08 | Modelos Computacionais e Modelos Químicos. Minimização de Energia.   |                 |
| 4.   | 04-09 | Otimização de Geometrias. Obtenção de Propriedades Moleculares   |                 |
| 5.   | 18-09 | Desenvolvimento de Scripts   |                 |
| 6.   | 25-09 | Cálculos de Frequências Vibracionais. Seleção de Métodos de Estrutura Eletrônica Apropriados                                       |                 |
| 7.   | 02-10 | Reações Químicas e Reatividade.  |                 |
| 8.   | 09-10 | Reações Químicas e Reatividade.  |                 |



|     |       |   |
|-----|-------|---|
| 9.  | 16-10 | Entrega 1VA.  |
| 10. | 30-10 | Avaliação de Trajetórias Reativas e não-Reativas via Dinâmica Molecular Ab Initio |
| 11. | 06-11 | Avaliação de Trajetórias Reativas e não-Reativas via Dinâmica Molecular Ab Initio |
| 12. | 13-11 | Estudos de Processos Reativos via Metadinâmica                                    |
| 13. | 20-11 | Estudos de Processos Reativos via Integrais de Trajetória.                        |
| 14. | 27-11 | Estudos de Processos Reativos via Integrais de Trajetória.                        |
| 15. | 04-12 | Entrega 2VA.  |

---

#### 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.

---

#### 5. Métodos e instrumentos avaliativos

A nota final do aluno será dada pela fórmula

N1 → Apresentação de artigo (qualis  $\geq$ B1) 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, 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.