



MINISTÉRIO DA EDUCAÇÃO
UNIVERSIDADE FEDERAL DO PARANÁ
SETOR PALOTINA

Departamento Palotina

Ficha 2 (variável)

Disciplina: Química Computacional						Código: DEE462		
Natureza: <input type="checkbox"/> Obrigatória <input checked="" type="checkbox"/> Optativa			<input checked="" type="checkbox"/> Semestral				<input type="checkbox"/> Anual	<input type="checkbox"/> Modular
Pré-requisito:		Co-requisito:		Modalidade: <input checked="" type="checkbox"/> Totalmente Presencial <input type="checkbox"/> Totalmente EAD <input type="checkbox"/> Parcialmente EAD: _____ *CH				
CH Total: 36 CH Semanal: 2 Prática como Componente Curricular (PCC): Atividade Curricular de Extensão (ACE):	Padrão (PD): 36	Laboratório (LB):	Campo (CP):	Estágio (ES):	Orientada (OR):	Prática Específica (PE):	Estágio de Formação Pedagógica (EFP):	
<p>Indicar a carga horária semestral (em PD-LB-CP-ES-OR-PE-EFP-EXT-PCC)</p> <p>*indicar a carga horária que será à distância.</p> <p style="text-align: center;">EMENTA</p> <p>Introdução aos métodos empregados atualmente em química computacional. Descrição de várias técnicas e aplicações em moléculas simples e complexas. Softwares modernos e seu emprego na solução de problemas práticos da química. Mecânica Molecular. Métodos semi-empíricos e Métodos mecânico-quânticos. Aplicação em simulação de propriedades estruturais e espectroscópicas.</p> <p style="text-align: center;">PROGRAMA</p> <p>História da Química Computacional Mecânica molecular Métodos semi-empíricos Métodos quânticos Softwares e aplicações</p> <p style="text-align: center;">OBJETIVO GERAL</p> <p>Fornecer ao aluno as bases iniciais para o uso da química computacional</p> <p style="text-align: center;">OBJETIVO ESPECÍFICO</p> <p>Compreensão dos principais métodos usados atualmente Aplicações em problemas atômicos e moleculares</p>								

PROCEDIMENTOS DIDÁTICOS

Aulas presenciais em sala de aula e, quando possível, no laboratório de informática.

FORMAS DE AVALIAÇÃO

Provas e/ou atividades problemas, com nota de 0 a 100, sendo a média ponderada no final como nota final.

BIBLIOGRAFIA BÁSICA (mínimo 03 títulos)

- ALCACER, L. Introdução à Química Quântica Computacional; IST - Instituto Superior Técnico, 2007.
- ALCACER, L. Introdução à Mecânica Quântica: com Aplicações a Química Computacional Moderna, 1ª Edição.; Livraria da Física, 2012.
- MORGON, N. H.; COUTINHO, K. Métodos de Química Teórica e Modelagem Molecular, 1ª Edição.; Livraria da Física: São Paulo, 2007.

BIBLIOGRAFIA COMPLEMENTAR (mínimo 05 títulos)

- TRSIC, M.; PINTO, S. M. F. Química quântica: Fundamentos E Aplicações, 1ª Edição.; Editora Manole: Barueri, 2009.
- ANDREI, C. C.; FERREIRA, D. T.; FACCIÓN, M.; FARIA, T. de J. Da Química Medicinal à Química Combinatória e Modelagem Molecular: um Curso Prático; Manole, 2012.
- YOUNG, D. Computational Chemistry: A Practical Guide for Applying Techniques to Real World Problems, 1ª Edição.; Wiley-Interscience: New York, 2001.
- LEACH, A. R.; LEACH. Molecular Modelling: Principles and Applications, 2ª Edição.; Prentice Hall: Harlow, England ; New York, 2001.
- CRAMER, C. J. Essentials of Computational Chemistry: Theories and Models, 2ª Edição.; John Wiley & Sons: Chichester, West Sussex, England ; Hoboken, NJ, 2004.
- JENSEN, F. Introduction to Computational Chemistry, 3ª Edição.; Wiley: Chichester, UK ; Hoboken, NJ, 2017.



Documento assinado eletronicamente por **ISAC GEORGE ROSSET, PROFESSOR DO MAGISTERIO SUPERIOR**, em 01/04/2022, às 15:44, conforme art. 1º, III, "b", da Lei 11.419/2006.



A autenticidade do documento pode ser conferida [aqui](#) informando o código verificador **4387263** e o código CRC **6D25F21B**.