

UNIVERSIDADE FEDERAL DA PARAÍBA
CENTRO DE CIÊNCIAS EXATAS E DA NATUREZA
DEPARTAMENTO DE QUÍMICA

Componente Curricular: MÉTODOS COMPUTACIONAIS EM QUÍMICA (OPTATIVA)

Carga Horária: 60 horas.

Numero de Créditos: 04

Pré-Requisitos: QUÍMICA QUÂNTICA E ESPECTROSCOPIA

Público-alvo: Bacharelado em Química.

OBJETIVOS: Introduzir as principais aproximações e limitações envolvidas nos métodos de química quântica e mecânica molecular. Demonstrar como esses métodos podem ser utilizados na obtenção de propriedades moleculares de interesse químico. Apresentar o formalismo envolvido na construção dos mesmos, utilizando o método de Hartree-Fock como ponto de partida. Dar início ao uso de ferramentas computacionais para resolução de problemas numéricos e algébricos

HABILIDADES E COMPETÊNCIAS: Compreender a utilização dos métodos de química quântica como uma ferramenta de auxílio na obtenção de propriedades moleculares. Saber escolher um método/técnica apropriado para resolver um determinado problema acerca de sistemas atômicos e moleculares. Compreender e interpretar os resultados obtidos a partir de um cálculo de química quântica e mecânica molecular. Estabelecer relações entre a estrutura eletrônica e as propriedades moleculares. Dar início ao uso de ferramentas computacionais para resolução de problemas numéricos e algébricos

EMENTA/PROGRAMA

Mecânica molecular: Equações de Newton aplicadas a sistemas moleculares; Funções de energia potencial utilizadas em simulação; Propriedades obtidas a partir de uma simulação; O método de Monte Carlo; Simulação de líquidos e biomoléculas

Métodos *ab-initio*: Determinantes de Slater; O método de Hartree-Fock; O método de Hartree-Fock Roothan e a aproximação LCAO; Resolução iterativa das equações de Hartree-Fock; Falhas do método de Hartree-Fock; Correlação eletrônica e métodos pós-Hartree-Fock; Métodos perturbativos e variacionais;

Métodos semi-empíricos: Principais aproximações envolvidas na construção de um método semi-empírico; Parametrização; Os principais métodos semi-empíricos;

Métodos DFT: As equações de Kohn-Sham e a densidade eletrônica; Principais aproximações e métodos envolvidos na teoria DFT.

METODOLOGIA

Aulas expositivas.

AVALIAÇÃO :

Provas escritas e seminários.

BIBLIOGRAFIA

1. JENSEN, F., *Introduction to Computational Chemistry*, John Wiley & Sons Ltd.: London, 2002.
2. CRAMER, C.J., *Essentials of Computational Chemistry: Theories and Models*, John Wiley & Sons Ltd.: London, 2nd Edition, 2002.
3. SZABO, A; OSTLUND, N. S., *Modern Quantum Chemistry : Introduction to Advanced Electronic Structure Theory*, McGraw-Hill Publishing Company, New York, 1989.
4. POPLÉ, J.A.; Beveridge, D. L., *Approximate Molecular Orbital Theory*, McGraw-Hill, New York, 1970, Series in Advanced Chemistry.