

Química Computacional II

Créditos: 04

Carga Horária: 60 horas

Ementa: Conceitos Iniciais. Mecânica Molecular. Campos de Força mais Utilizados. Aplicações dos Métodos de Mecânica Molecular. Métodos Semi-Empíricos. Método de Hückel. Aproximação ZDO. Métodos CNDO, INDO e NDDO. O Método INDO/S. O Método MNDO. Família de Métodos baseados no MNDO. Métodos Atuais.

Programa:

1. Conceitos Iniciais

- Vibrações Moleculares;
- Tratamento Quântico da Vibração Molecular;
- Potencial de Morse;
- Superfícies de Energia Potencial;
- Potenciais Empíricos mais Avançados

2. Mecânica Molecular

- Princípios;
- Campos de Força;
- Parcelas da Energia;
- Interações Eletrostáticas;
- Parametrização de um Campo de Força

3. Campos de Força mais Utilizados

- AMBER, OPLS, MM+, etc.

4. Aplicações dos Métodos de Mecânica Molecular

- Otimização de Geometria;
- Análise Conformacional

5. Métodos Semi-Empíricos

- Equações de Hartree-Fock;
- Teoria dos Orbitais Moleculares

6. Método de Hückel

- Formalismo;
- Aplicação

7. Aproximação ZDO

8. Métodos CNDO, INDO e NDDO

- Invariância Rotacional;
- Aproximações e Equações;
- Integrais;
- Ortogonalização da Base;
- Parametrização;
- Versões

9. O Método INDO/S

10. O Método MNDO

- Filosofia do Método MNDO;
- Integrais Paramétricas;
- Parametrização;

- Programa Mopac

11. Família de Métodos baseados no MNDO

- AM1;
- PM3;
- PM5;
- SAM1;
- Comparação entre os Métodos

12. Métodos Atuais

- RM1;
- Sparkle/AM1;
- Demais Métodos: PDDG, OM1, OM2, etc.

13. Estado-da-Arte em Métodos Semi-Empíricos e Mecânica Molecular

- a. Métodos de Escalonamento Linear
- b. Cálculos de Proteínas usando Métodos Semi-Empíricos
- c. QM/MM aplicado a Enzimas

Referências Bibliográficas

- Pople, J.A.; Beveridge, D. L., **Approximate Molecular Orbital Theory**, *Series in Advanced Chemistry*, McGraw-Hill, New York, 1970.
- Jensen, F., **Introduction to Computational Chemistry**, John Wiley & Sons, New York, 2002.
- Cramer, C.J., **Essentials of Computational Chemistry: Theories and Models**, 2^a ed., John Wiley & Sons, New York, 2002.
- Szabo, A; Ostlund, N. S., **Modern Quantum Chemistry: Introduction to Advanced Electronic Structure Theory**, Dover Publications, New York, 1989.
- Foresman, J.B.; Frisch, A., **Exploring Chemistry with Electronic Structure Methods: A Guide to Using Gaussian**, *Gaussian Inc.*, 1993.
- Stewart, J. J. P., **MOPAC manual**, Fujitsu Limited, Tokyo, 2002.
- Artigos recentes da literatura.