



UNIVERSIDADE FEDERAL DE SANTA CATARINA
CENTRO DE CIÊNCIAS FÍSICAS E MATEMÁTICAS
DEPARTAMENTO QUÍMICA - PLANO DE ENSINO

SEMESTRE 2018-2

I. IDENTIFICAÇÃO DA DISCIPLINA: Tópicos Especiais em Química Inorgânica: Química Computacional

CÓDIGO	NOME DA DISCIPLINA	N ^o DE HORAS-AULA SEMANAIS		TOTAL DE HORAS-AULA SEMESTRAIS
		TEÓRICAS	PRÁTICAS	
QMC XXXX	Química Computacional	04	-	60
HORÁRIO: quinta-feira 13:30-17h				
TURMAS TEÓRICAS			TURMAS PRÁTICAS	
-			-	

II. PRÉ-REQUISITO (S)

CÓDIGO	NOME DA DISCIPLINA
	Não existe pré-requisito.

III. PROFESSOR (ES) MINISTRANTE (S)

Professor Bernardo de Souza

IV. EMENTA

Introdução à modelagem molecular. Mecânica molecular. Cálculo de energia de isômeros e confôrmeros. O método Hartree-Fock. Funções de base e orbitais moleculares. Teoria do funcional de densidade (DFT). Introdução de correlação: MP2. Métodos de inclusão de solvatação. Otimização de geometrias. Cálculo de frequências vibracionais e energia livre de Gibbs. Cálculo de constantes de Equilíbrio. Cálculo de Espectro UV/Vis. Cálculo de propriedades magnéticas: EPR e RMN.

V. OBJETIVOS

- Utilizar métodos computacionais simples para cálculo de estrutura eletrônica de moléculas.
- Compreender as diferenças entre métodos como HF e DFT e sua relação com a correlação eletrônica.
- Poder ser capaz de selecionar o método mais adequado para seu problema específico, sem perder qualidade no resultado do cálculo.
- Usar aproximações que possam acelerar a computação dos resultados, compreendendo suas implicações.
- Utilizar métodos de solvatação implícita, compreendendo as diferenças em relação à explícita.
- Calcular propriedades como espectro de infravermelho, UV/VIS, RMN, EPR, potencial redox e etc.

VI. CONTEÚDO PROGRAMÁTICO

- Modelagem e Mecânica molecular.
- Energia de isômeros e confôrmeros.
- Introdução ao HF e orbitais moleculares.
- Funções de base e convergência para o limite.
- Método de perturbação de segunda ordem, MP2.
- Otimização de geometrias.

- DFT e funcionais.
- Métodos de solvatação.
- Frequências vibracionais e energia livre de Gibbs: espectro no infravermelho.
- Cálculo de constantes de equilíbrio e o BSSE.
- Espectro UV/Vis.
- Espectro de RMN.
- Parâmetros de EPR.

VII. METODOLOGIA DE ENSINO E AVALIAÇÃO

As aulas serão basicamente “experimentais”, com foco na aplicação e não na teoria, visto que existem outras disciplinas com este objetivo. É necessário que cada aluno traga um computador para a aula, com qualquer sistema operacional e os softwares usados serão todos livres, de forma que não haverá nenhum custo adicional.

A avaliação será feita através dos exercícios feitos em sala e de uma apresentação no final do semestre de um projeto relacionado à disciplina e seu trabalho.

VIII. BIBLIOGRAFIA

1. JENSEN, F. **Introduction to Computational Chemistry**. 3 ed., Wiley, 2017, 660p.
2. CRAMER, C. J. **Essentials of Computational Chemistry: Theory and Models**. 2 ed. Wiley, 2004, 618p.
3. HELGAKER, T.; JORGENSEN, P.; OLSEN, J. **Molecular Electronic-Structure Theory**. 1 ed. Wiley, 2013, 944.
4. ATKINS, P. W.; FRIEDMAN, R. S. **Molecular Quantum Mechanics**. 5 ed. Oxford Press, 2010. 592p.