



MEC-UNIVERSIDADE FEDERAL RURAL DO RIO DE JANEIRO
DECANATO DE PESQUISA E PÓS-GRADUAÇÃO

PROGRAMA ANALÍTICO

DISCIPLINA

CÓDIGO IC – IC 1341 CRÉDITOS – 2 (1T, 1P)	NOME: Modelagem Molecular I Cada crédito corresponde a 15h / aula
---	---

DEPARTAMENTO DE QUÍMICA
INSTITUTO DE CIÊNCIAS EXATAS

OBJETIVO DA DISCIPLINA: apresentar os fundamentos teóricos e aspectos práticos no uso de programas de modelagem molecular

EMENTA:

1. Modelos de Campo de Força Empírico: Mecânica Molecular. Teoria.
2. Modelos de Campo de Força Empírico. Experimental.
3. Modelos Quanto-Mecânicos. Teoria.
4. Modelos Quanto-Mecânicos. Experimental.

1. PROGRAMA ANALÍTICO

1. **Mecânica Molecular, Teoria:** Introdução. Modelos moleculares. Sistemas de coordenadas. Campos de força. Funções de energia potencial: estiramento de ligação, dobramento de ângulo, torção de diedro, deslocamento de plano, termos cruzados e interações não-ligantes. Parametrização de campos de força. Campos de força especiais. Minimização de energia: métodos de primeira e de segunda derivada.

2. **Mecânica Molecular, Experimental:** Programas de mecânica molecular para micro-computadores. Construção, minimização e avaliação de estruturas químicas por mecânica molecular. Superfícies de energia potencial. Efeitos estérico e eletrônico. Ressonância: parâmetros variáveis por cálculos de Hückel extendidos.

3. **Métodos Quânticos, Teoria:** Introdução. Modelo de Bohr: espectro de linhas e comportamento ondulatório do elétron no átomo. Mecânica Quântica: função de onda e equação de Schrödinger. Ligação química: orbitais moleculares como combinações lineares de orbitais atômicos. Diagramas de energia: moléculas diatômicas homo e heteronucleares. Funções de base. Métodos Hartree-Fock: RHF e UHF. A aproximação semi-empírica. Correlação eletrônica. Teoria do funcional de densidade. Propriedades: ordem de ligação, densidade eletrônica, carga, potencial eletrostático e momento de dipolo. Otimização de geometrias: estados fundamentais e estados de transição. Coordenada de reação.

4. **Métodos Quânticos, Experimental:** Programas de mecânica quântica para micro-computadores. Construção de geometrias moleculares. Análise e interpretação de resultados de cálculos: matrizes e gráficos moleculares. Funções termodinâmicas. Exemplos de mecanismos de reação: perfis de reações e estados de transição.

Bibliografia

Leach, A. "Computational Chemistry: Principles and Applications". 2^a Edição. Printice Hall, 2001, New York.

Jensen, F., "Introduction to Computational Chemistry". John Wiley & Sons, 1999, New York.

Clark, T., "Handbook of Computational Chemistry: a Practical Guide to Chemical Structure and Energy Calculations". John Wiley & Sons, 1985, New York.

Grant, G. H. & Richards, W. G., "Computational Chemistry". Oxford Science Publications, 1995, Oxford.

Burkert, U. & Allinger, N. L., "Molecular Mechanics", ACS Monograph 177. American Chemical Society, 1982, Washington, D.C.

Stewart, J.J.P., "MOPAC, a Semiempirical Molecular Orbital Program". J. Comp.-Aided Mol. Des. 4(1) (1990) 1-105.