

	UNIVERSIDADE ESTADUAL DE SANTA CRUZ PROREITORIA DE PESQUISA E PÓS-GRADUAÇÃO DEPARTAMENTO DE CIÊNCIAS EXATAS PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM QUÍMICA	
---	---	---

CÓDIGO		DISCIPLINA
DEX101455		Aplicações Computacionais em Química
C/HORÁRIA	CRÉDITOS	
Teórica: 30h	2	
Prática: 30h	2	
Total: 60h	4	

EMENTA	Fundamentos da Química Quântica. Métodos Computacionais e Modelagem Molecular. Espectroscopia Computacional. Aulas no laboratório de informática.
---------------	---

OBJETIVOS	Integrar habilidades computacionais com os princípios fundamentais da química teórica, proporcionando aos alunos uma compreensão mais profunda dos conceitos e teorias subjacentes. Esse plano busca capacitar os alunos a aplicar métodos computacionais para simular e analisar sistemas químicos complexos, como estruturas moleculares, propriedades termodinâmicas e reações químicas.
------------------	---

METODOLOGIA	A metodologia deste plano de ensino será baseada em uma abordagem <i>hands-on</i> , combinando teoria e prática para promover uma compreensão abrangente dos conceitos que compõem o conteúdo programático. As aulas serão estruturadas em torno de uma combinação de palestras expositivas, demonstrações práticas e exercícios computacionais.
--------------------	--

AVALIAÇÃO	A avaliação da disciplina será baseada em provas (40% da nota), e em metodologias ativas como apresentações (sala de aula invertida), trabalhos individuais e em grupo, aprendizagem baseadas em projetos/problemas e cooperativa (60% da nota).
------------------	--

CONTEÚDO PROGRAMÁTICO	Módulo 1 - Fundamentos da Química Quântica 1.1 Introdução à mecânica quântica e princípios básicos; 1.2 Funções de onda; 1.3 Equação de Schrodinger; 1.4 Postulados da mecânica quântica; 1.5 Oscilador harmônico e rotor rígido; 1.6. Átomo de hidrogênio.
------------------------------	--

Módulo 2 - Métodos Computacionais e Modelagem Molecular

- 2.1 Métodos de aproximação;
- 2.2 Métodos semiempíricos e ab initio (Hartree-Fock);
- 2.3 Introdução à teoria do funcional da densidade (DFT);
- 2.4 Cálculos de estrutura eletrônica de moléculas e íons;
- 2.5 Aplicações de softwares de química quântica em problemas reais.

Módulo 3 - Espectroscopia Computacional

- 3.1 Espectroscopia vibracional e rotacional;
- 3.2 Espectroscopia eletrônica e fotofísica molecular;
- 3.3 Cálculos de espectros usando métodos quânticos.

Observação: É desejável mas não obrigatoriamente que o discente tenha concluído todas as disciplinas de álgebra linear, cálculo, física, e físico-química.

REFERÊNCIA BIBLIOGRÁFICA	
-------------------------------------	--

1. Planck, M. and Bohr, N. *Quantum Theory*, Edit. Class CS, 2024.
2. Griffiths, D. J. *Introdução à Mecânica Quântica*. Edit. Livros Técnicos e Científicos, 2021.
3. Sakurai, J. J. e Napolitano, J. *Modern Quantum Mechanics*, 3rd ed., 2020, Edit. Cambridge University Press, 2020.
4. McQuarrie, D. e Simon, J. D. *Química Quântica: Uma Abordagem Moderna*, Edit. LTC, 2020.
5. Lewars, E. G. *Computational Chemistry: Introduction to the Theory and Applications of Molecular and Quantum Mechanics*, 4th ed., Edit. Springer, 2024.
6. Jensen, F. *Introduction to Computational Chemistry*. 3rd ed., Edit. Wiley, 2017.
7. Shankar, R. *Principles of Quantum Mechanics*, Edit. LTC, 2021.