

unioeste

Universidade Estadual do Oeste do Paraná
Campus de Toledo

Rua da Faculdade, 645 - Jd. Santa Maria - Fone: (45) 3379-7060 - CEP 85903-000 - Toledo – PR

Email: toledo.mestradoquimica@unioeste.br



PARANÁ
GOVERNO DO ESTADO

Anexo II – Resolução nº 133/2003-CEPE

UNIVERSIDADE ESTADUAL DO OESTE DO PARANÁ PRÓ-REITORIA DE PESQUISA E PÓS-GRADUAÇÃO

PLANO DE ENSINO - PERÍODO LETIVO/ANO 1º/2021

Programa: Programa de Pós-Graduação em Química - PPGQUI

Área de Concentração: Química

Mestrado em Química

Centro das Engenharias e Ciências Exatas - CECE

Campus de Toledo

DISCIPLINA

Código	Nome	Carga horária		
		AT ¹	AP ²	Total
	Química Teórica e Computacional	60		60

¹ Aula Teórica; ² Aula Prática)

Ementa

Introdução aos conceitos básicos de química quântica. Descrição geral de métodos teóricos (semi-empíricos, *ab initio*). Cálculos de propriedades estruturais, eletrônicas, espectroscópicas e termodinâmicas, dentre outras. Estudo de mecanismos de reações (estado de transição, intermediários e coordenada de reação).

Objetivos

Propiciar ao aluno uma visão global dos principais métodos de elucidação estrutural por RMN.

Conteúdo Programático

<ul style="list-style-type: none"> • Introdução a Mecânica Quântica <p>Ideias fundamentais da mecânica quântica; Equação de Schrödinger; Alguns formalismos da mecânica quântica</p> <ul style="list-style-type: none"> • Introdução a Química Quântica <p>Osciladores harmônicos e vibrações moleculares Átomo de Hidrogênio Métodos Aproximados de Resolução da Equação de Schrödinger</p> <ul style="list-style-type: none"> • Teoria dos Orbitais • Métodos em Química Teórica e Computacional <p>Métodos Hartree-Fock Métodos <i>Ab Initio</i> Métodos Pós-Hartree-Fock Métodos Perturbacionais (Teoria das Perturbações de Møller-Plesset) Métodos Semiempíricos Hückel Simples Método de Hückel Estendido Método de Pariser-Parr-Pople (PPP) Métodos de CNDO e INDO Métodos Paramétricos (MINDO, MNDO, AM1, PM3, SAM1 e MINDO/d)</p> <ul style="list-style-type: none"> • Teoria do Funcional da Densidade • Uso de softwares para estudos estruturais, eletrônicos, termodinâmicos, espectroscópicos e reacionais de moléculas e reações químicas.
--

Atividades Práticas

Não estão previstas atividades práticas presenciais.

Metodologia

Devido à pandemia do COVID-19 e considerando a Resolução nº 052/2020 – CEPE, a metodologia adotada excepcionalmente abrangerá o envio de materiais de apoio. Aulas remotas síncronas realizadas por meio de aplicativos como *Google Meet* ou *Microsoft Teams* serão realizadas para discussão dos temas. Tarefas sobre os temas serão solicitadas, avaliadas e o docente dará *feedback* aos discentes. Recursos como textos e temas de caráter científico em artigos científicos serão utilizados. Caso as aulas voltem a ser presenciais, serão utilizadas aulas expositivas incentivando a participação e valorizando os conhecimentos prévios dos acadêmicos.

Avaliação

(critérios, mecanismos, instrumentos e periodicidade)

A avaliação do rendimento do aluno na disciplina será obtida a partir de avaliações (AV.) (valor de 0 a 10) e atividades extras, como seminários e/ou listas de exercícios (AE) (valor de 0 a 10).

A média final da disciplina será apurada segundo a equação abaixo:

$$Média = 0,7. \left(\sum AV. \right) + 0,3. \left(\sum AE \right)$$

Para aprovação final o aluno deverá obter média final igual ou superior a 7,0 (sete) e 75% (setenta e cinco por cento) de frequência.

Bibliografia básica

Bibliografia:

- ALCACER, L. Introdução à Química Quântica Computacional; IST - Instituto Superior Técnico, 2007.
- ALCACER, L. Introdução à Mecânica Quântica: com Aplicações a Química Computacional Moderna, 1ª Edição.; Livraria da Física, 2012.
- MORGON, N. H.; COUTINHO, K. Métodos de Química Teórica e Modelagem Molecular, 1ª Edição.; Livraria da Física: São Paulo, 2007.

Bibliografia complementar

- TRSIC, M.; PINTO, S. M. F. Química quântica: Fundamentos E Aplicações, 1ª Edição.; Editora Manole: Barueri, 2009.
- ANDREI, C. C.; FERREIRA, D. T.; FACCIONE, M.; FARIA, T. de J. Da Química Medicinal à Química Combinatória e Modelagem Molecular: um Curso Prático; Manole, 2012.
- YOUNG, D. Computational Chemistry: A Practical Guide for Applying Techniques to Real World Problems, 1ª Edição.; Wiley-Interscience: New York, 2001.
- LEACH, A. R.; LEACH. Molecular Modelling: Principles and Applications, 2ª Edição.; Prentice Hall: Harlow, England ; New York, 2001.
- CRAMER, C. J. Essentials of Computational Chemistry: Theories and Models, 2ª Edição.; John Wiley & Sons: Chichester, West Sussex, England ; Hoboken, NJ, 2004.
- JENSEN, F. Introduction to Computational Chemistry, 3ª Edição.; Wiley: Chichester, UK ; Hoboken, NJ, 2017.

Docentes

Prof. Dr. Isac G. Rosset

Data: 05 / 04 / 2021

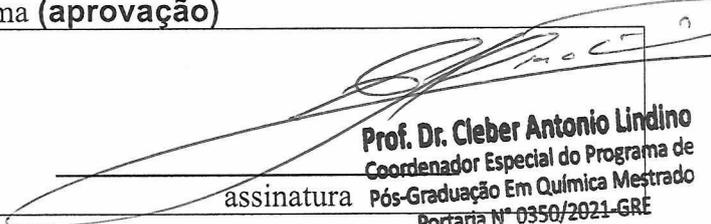

Assinatura do docente responsável pela disciplina

Colegiado do Programa (aprovação)

Ata nº 002/2021, de 05 / 04 / 2021

Coordenador:

assinatura


Prof. Dr. Cleber Antonio Lindino
Coordenador Especial do Programa de
Pós-Graduação Em Química Mestrado
Portaria N° 0350/2021-GRE

Conselho de Centro (homologação)

Ata de nº 02, de 12/04 / 2021

Diretor de Centro:

Évio Antônio de Campos
Diretor do Centro de Engenharias
e Ciências Exatas
Portaria nº 0027/2020-GRE
Unigeste - Campus de Toledo

assinatura



Encaminhada cópia à Secretaria Acadêmica em: / / .

Nome/assinatura