



Portal do Coordenador
Stricto

UNIVERSIDADE FEDERAL DA INTEGRAÇÃO LATINO-AMERICANA
SISTEMA INTEGRADO DE GESTÃO DE ATIVIDADES ACADÊMICAS

EMITIDO EM 10/09/2018 16:55

RESUMO DO COMPONENTE CURRICULAR

Dados Gerais do Componente Curricular			
Tipo do Componente Curricular:	DISCIPLINA		
Unidade Responsável:	PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM FÍSICA APLICADA		
Código:	FIS0025		
Nome:	MODELAGEM MOLECULAR E SIMULAÇÃO DE REAÇÕES		
Carga Horária Teórica:	60 h.		
Carga Horária Prática:	0 h.		
Carga Horária Total:	60 h.		
Excluir da Avaliação Institucional:	Não		
Matriculável On-Line:	Sim		
Horário Flexível da Turma:	Não		
Horário Flexível do Docente:	Sim		
Obrigatoriedade de Conceito:	Sim		
Pode Criar Turma Sem Solicitação:	Não		
Necessita de Orientador:	Não		
Proíbe Aproveitamento:	Não		
Exige Horário:	Sim		
Permite CH Compartilhada:	Não		
Quantidade de Avaliações:	1		
Ementa/Descrição:	<p>Aspectos básicos da Mecânica Quântica. Estrutura eletrônica dos átomos. Equação de Shrödinger para sistemas multieletrônicos e aproximação de Born-Oppenheimer. Função de onda Generalized Valence Bond. Métodos de modelagem molecular: Moller-Plesset (MP2, MP4), Rayleigh-Schrödinger (CASPT2), Coupled-Cluster (CC). Semiempíricos. Complete Active Space Self Consistent Field (CASSCF). Configuration Interaction (CI). Density Funcional Theory (DFT). Modelagem molecular além da aproximação de Born-Oppenheimer. Mecânica molecular. Dinâmica quase - clássica. Método híbrido. Dinâmica quântica. Cinética físico-química. Efeito solvente.</p>		
Referências:	<p>Ira N. Levine, Quantum Chemistry, Fourth Edition, Prentice-Hall, Inc. A Simon & Schuster Company, 1991, Englewood Cliffs, New Jersey. Frank L. Pilar, Elementary Quantum Chemistry, Second Edition, McGraw-Hill Publishing Company, 1990, Singapore. A. Szabo, N. S. Ostlund, Modern Quantum Chemistry, McGraw-Hill, 1989, New York. Nelson H. Morgon e Kalline Coutinho (Eds), Editora Livraria da Física, 2007, São Paulo. Marco Antonio Chaer Nascimento (de.), The chemistry of the XXI Century, Molecular Modeling, World Scientific, 1992, Singapore. J. D. M. Vianna, A. Fazzio, S. Canuto, Teoria Quântica de Moléculas e Sólidos, Editora Livraria da Física, 2004, São Paulo. J. N. Murrell, S. Carter, S. C. Farantos, P. Huxley and A. J. C. Varandas, Molecular Potential Energy Functions, John Wiley and Sons, 1984, London. P. W. Atkins, R. S. Friedman, Molecular Quantum Mechanics, Third Edition, Oxford University Press, 1997, New York. P. W. Atkins, R. S. Friedman, Solutions Manual for Molecular Quantum Mechanics, Third Edition, Oxford University Press, 1997, New York. P. Atkins, J. De Paula, Physical Chemistry, Ninth Edition, Oxford University Press, 2010, New York. V. Kondratyev, The Structure of Atoms and Molecules, Mir, 1967, Moscow. L. D. Landau, E. M. Lifshitz, Mecânica Cuántica No- Relativista, Curso de Física Teórica, V. 3, Editorial Reverté, 1967, Barcelona.</p>		
HISTÓRICO DE EQUIVALÊNCIAS			
Expressão de Equivalência	Ativa	Início da Vigência	Fim da Vigência
	Sim	03/03/2016	-

