



**UNIVERSIDADE FEDERAL DE SÃO CARLOS  
PRÓ-REITORIA DE PÓS-GRADUAÇÃO**

Via Washington Luís, Km 235 - Caixa Postal 676

Fones: (16) 3351-8109 / 3351-8110

Fax: (16) 3361-3176

CEP 13.565-905 - São Carlos - SP - Brasil

End. Eletrônico: progg@ufscar.br

**FICHA DE CARACTERIZAÇÃO DE DISCIPLINAS**

**1. Programa de Pós-Graduação em:**

Programa de Pós-Graduação em Química

**2. Objetivo da Ficha:** Criação de disciplina.

Código da Disciplina	QUI.101	Total de Créditos	13	Início de Validade	1o. período de 2025
----------------------	---------	-------------------	----	--------------------	---------------------

Nome da Disciplina	Química Computacional Contemporânea: Fundamentos e Aplicações
--------------------	---

**Campos a serem Alterados**

<input type="checkbox"/> Código da Disciplina	<input type="checkbox"/> Nome da Disciplina	<input type="checkbox"/> Carga Horária	<input type="checkbox"/> Ementa
Código Anterior:	<input type="checkbox"/> Créditos	<input type="checkbox"/> Pré-Requisitos	

Justificativa:

Nova grade curricular a partir de 2025

**3. Carga Horária da Disciplina:**

Aulas Teóricas	72	Aulas Práticas	0	Exercícios e Seminários	123
----------------	----	----------------	---	-------------------------	-----

**4. Ementa da Disciplina:**

1. Fundamentos: Equações fundamentais da mecânica clássica e quântica.
2. Métodos de Estrutura Eletrônica: Métodos baseados em função de onda; Teoria do funcional da densidade.
3. Campos de Força: Equações, parametrização e validação.
4. Dinâmica Molecular: Métodos de dinâmica molecular; Análise de trajetórias.
5. Aplicações: Determinação de propriedades moleculares; Simulação de reações químicas; Simulação de propriedades espectroscópicas; Simulação de propriedades termodinâmicas.

## 5. Caráter da Disciplina:

Criada para o curso de:

Mestrado

Doutorado

Mestrado Profissional

Todos

Caráter para mestrado:

Obrigatória para:

Optativa para: Química.

Alternativa para:

Área de Concentração para:

Específica de Linha para:

Caráter para doutorado:

Obrigatória para:

Optativa para: Química.

Alternativa para:

Área de Concentração para:

Específica de Linha para:

Caráter para mestrado profissional:

Obrigatória para:

Optativa para:

Alternativa para: Ensino em Química, Química Tecnológica.

Área de Concentração para:

Específica de Linha para:

## 6. Disciplinas que São Pré-Requisitos:

## 7. Bibliografia Principal:

1- F. Jansen, Introduction to Computational Chemistry, John Wiley & Sons, 1999.

2- C. J. Cramer, Essentials of Computational Chemistry, John Wiley & Sons, 2004.

3- D. B. Cook, Handbook of Computational Quantum Chemistry, Dover Publications Inc., 2005.

4- A. Szabo, N. S. Ostlund, "Modern Quantum Chemistry: Introduction to Advanced Electronic Structure Theory". 1st ed., revised, McGraw-Hill Publishing Co., 1989.

5- T. Helgaker, P. Jørgensen, and J. Olsen, Molecular Electronic-Structure Theory, Wiley, 2000.

6- Leticia González, Roland Lindh. 1st ed., Quantum Chemistry and Dynamics of Excited States: Methods and Applications, Wiley, 2020.

7- Artigos de revisão e científicos associados a ementa.

## 8. Principais Docentes Responsáveis:

Ana Paula de Lima Batista

Alejandro Lopez Castillo

Andre Farias de Moura

## 9. Aprovação da Coordenação do Programa de Pós-Graduação:

Aprovada na 571a. reunião da coordenação deste programa de pós-graduação, realizada em 05/02/2025.

\_\_/\_\_/\_\_

Assinatura do Coordenador do Programa

## 10. Aprovação do Centro: