



MINISTÉRIO DA EDUCAÇÃO  
UNIVERSIDADE FEDERAL DO PARANÁ  
SETOR PALOTINA

Departamento de Engenharias e Exatas

Ficha 1 (permanente)

Disciplina: Química Computacional						Código: DEE462	
Natureza: ( ) Obrigatória ( ) Optativa			( X ) Semestral      ( ) Anual      ( ) Modular				
Pré-requisito:		Co-requisito:		Modalidade: ( X ) Presencial    ( ) Totalmente EAD    ( ) CH em EAD:			
CH Total: 30 CH Semanal: 02	Padrão (PD): 30	Laboratório (LB): 0	Campo (CP): 0	Estágio (ES): 0	Orientada (OR): 0	Prática Específica (PE): 0	Estágio de Formação Pedagógica (EFP): 0

EMENTA

Introdução e história da química computacional. Descrição de técnicas e aplicações em moléculas simples e complexas. Softwares modernos e seu emprego na solução de problemas práticos da química. Mecânica Molecular. Métodos semi-empíricos e Métodos mecânico-quânticos. Aplicação em simulação de propriedades estruturais, eletrônicas e espectroscópicas.

\*OBS (1): ao assinalar a opção CH em EAD, indicar a carga horária que será à distância.



Documento assinado eletronicamente por **WILSON DE AGUIAR BENINCA, PROFESSOR DO MAGISTERIO SUPERIOR**, em 23/10/2020, às 12:30, conforme art. 1º, III, "b", da Lei 11.419/2006.



A autenticidade do documento pode ser conferida [aqui](#) informando o código verificador **3053551** e o código CRC **C87C9B7F**.

Art. 9º da Resolução 30/90 – CEPE

**Padrão (PD):** conjunto de estudos e atividades desenvolvidos fundamentalmente nos espaços de aprendizagem considerados padrão para as modalidades de ensino presencial e de educação à distância (EAD).

**Laboratório (LB):** conjunto de estudos e atividades desenvolvidos fundamentalmente em espaços de aprendizagem estabelecidos com infraestrutura especializada, tais como laboratórios, oficinas e estúdios.

**Campo (CP):** conjunto de estudos e atividades desenvolvidos fundamentalmente mediante atividades de campo.

**Estágio (ES):** conjunto de estudos e atividades desenvolvidos fundamentalmente em ambientes de trabalho mediante estágios regulados pela Lei nº 11.778, de 25 de setembro de 2008.

**Orientada (OR):** conjunto de estudos e atividades direcionados à vivência na atuação acadêmica e/ou profissional, em seus mais amplos aspectos, desenvolvidos em espaços educacionais internos e/ou externos à UFPR, com a participação direta de docente responsável.

**Práticas Específicas (PE):** conjunto de atividades de natureza prática, desenvolvidas em ambientes que apresentem restrições ao quantitativo de alunos por docente e que exijam controle rigoroso envolvendo questões de segurança, dignidade, privacidade e sigilo e/ou atenção do docente individualizada ou a pequenos grupos para desenvolvimento do processo de ensino-aprendizagem, com a participação direta do docente responsável.

**Estágio de Formação Pedagógica (EFP):** conjunto de estudos e atividades desenvolvidas fundamentalmente no âmbito da educação básica, sob a forma de “práticas de docência” e “práticas pedagógicas de organização do trabalho escolar”, envolvendo a orientação direta docente em ações que vão desde a intermediação no acordo de colaboração entre a UFPR e os estabelecimentos de ensino, até o acompanhamento sistemático e processual do planejamento, da execução e da avaliação das atividades desenvolvidas pelos licenciandos, o que requer o contato contínuo e presencial do professor nos diferentes campos de estágio e conseqüentemente a limitação de alunos por turma.

#### **BIBLIOGRAFIA BÁSICA (mínimo 03 títulos)**

1. MORGON, Nelson H.; COUTINHO, Kaline. **Métodos de Química Teórica e Modelagem Molecular**. Edição: 1. São Paulo: Livraria da Física, 2007.
2. ALCÁCER, Luís. **Introdução à Mecânica Quântica: com Aplicações à Química Computacional Moderna**. Edição: 1. [s.l.]: Livraria da Física, 2012.
3. TRSIC, Milan; PINTO, Siquira Melissa F. **Química quântica: Fundamentos e Aplicações**. Edição: 1ª. Barueri: Editora Manole, 2009.

#### **BIBLIOGRAFIA COMPLEMENTAR (mínimo 05 títulos)**

1. OLIVEIRA, André Mauricio de. **Introdução à Modelagem Molecular Para Química, Engenharia e Biomédicas. Fundamentos e Exercícios**. Edição: 1ª. [s.l.]: Appris, 2018.
2. ALCÁCER, Luís. **Introdução à Química Quântica Computacional**. [s.l.]: IST - Instituto Superior Técnico, 2007.
3. FORESMAN, James B.; FRISCH, Aeleen. **Exploring Chemistry with Electronic Structure Methods**. 3rd edition. Wallingford, CT: Gaussian, 2015.
4. FREITAS, Luiz Carlos Gomide; OLIVEIRA, Guedmiller Souza de. **Aplicações de química teórica no estudo de materiais: métodos in silico para nanomateriais**. [s.l.]: SciELO - EdUFSCar, 2018.
5. SILVA, Francisco Ivan da. **Explorando a Química Computacional**. [s.l.]: Simplíssimo, 2019.