

CONTEÚDO PROGRAMÁTICO, BIBLIOGRAFIA E ETAPAS DE PROVAS POR SETORIZAÇÃO

Etapas de Provas	Escrita	Conforme disposto nos Artigos 46 a 56 e Art. 63 da Resolução nº 16/2018 do CONSUNI.
	Didática	Conforme disposto no Artigo 58 da Resolução nº 16/2018 do CONSUNI.
	Títulos e Trabalhos	Conforme disposto no Artigo 28 e 59 da Resolução nº 16/2018 do CONSUNI.
	Arguição de Memorial	Conforme disposto no Artigo 57 da Resolução nº 16/2018 do CONSUNI.

Realização de Prova Prática: () Sim () Não

CCS - Instituto de Pesquisas de Produtos Naturais Walter Mors

Código	MC-034	Departamento / Setorização Definitiva	Química de Produtos Naturais / Química Teórica
Conteúdo Programático	<ol style="list-style-type: none"> 1. Princípios fundamentais da química quântica. Os postulados da mecânica quântica. As funções de onda multieletrônicas: a aproximação de Hartree-Fock. As funções de base. Os métodos semi-empíricos da teoria dos orbitais moleculares. Métodos de ligação de valência. Análise da função de onda. 2. Os tratamentos pós-Hartree-Fock para recuperação da energia de correlação eletrônica. Correlação dinâmica e estática. Características e princípios fundamentais dos métodos de correlação eletrônica. 3. Espectroscopia atômica e molecular. Transições espectroscópicas. Espectros rotacional e vibracional. Espectroscopia eletrônica. Ressonância magnética nuclear. 4. Modelagem de reatividade química e estados de transição. 5. Métodos de análise conformacional. 6. Cálculos de parâmetros de ressonância magnética nuclear: deslocamento químico e constante de acoplamento; 7. Reassinalamento estrutural de produtos naturais baseado na simulação teórica de parâmetros espectroscópicos. 8. Utilização de técnicas espectroscópicas em conjunto com métodos estatísticos e computacionais no auxílio do isolamento e identificação de substâncias bioativas 9. Métodos <i>ab initio</i> e DFT: teoria e aplicação 10. Modelos de solvatação implícita e explícita: teoria e aplicação 		
Bibliografia	<ul style="list-style-type: none"> • Cramer, C. J. <i>Essentials of Computational Chemistry: Theories and Models</i>, John Wiley & Sons: Chichester, 2002. • Jensen, F. <i>Introduction to Computational Chemistry</i>, 3rd. Ed., John Wiley & Sons: Chichester, 2017. • Leach, A. R. <i>Molecular Modelling: Principles and Applications</i>, 2nd. Ed., Prentice Hall: Harlow, 2001. • Morgon, N., Coutinho, K. <i>Métodos de Química Teórica e Modelagem Molecular</i>, Livraria da Física: São Paulo, 2007. • Levine, I. N. <i>Quantum chemistry</i>. 7th ed. Pearson Education, Inc: Upper Saddle River 2014. 		

- | | |
|--|--|
| | <ul style="list-style-type: none">• Young, C. J. <i>Computational Chemistry: A Practical Guide for Applying Techniques to Real-World Problems</i>, Wiley-Interscience: New York, 2001.• Helgaker, T.; Jaszunski, M.; Pecul, M. The quantum-chemical calculation of NMR indirect spin-spin coupling constants. <i>Progress in Nuclear Magnetic Resonance Spectroscopy</i>, v. 53, p. 249-268, 2008.• Grunenberg, J. <i>Computational Spectroscopy: Methods, Experiments and Applications</i>. WILEY-VCH Verlag GmbH&Co. KGaA, Boschstraße 12, 69469 Weinheim, 2010. |
|--|--|