



**UNIVERSIDADE FEDERAL RURAL DO RIO DE JANEIRO**  
**PRÓ-REITORIA DE PESQUISA E PÓS-GRADUAÇÃO**  
**SECRETARIA ACADÊMICA DE PÓS-GRADUAÇÃO (SAPG)**

**PROGRAMA ANALÍTICO**

DISCIPLINA

<b>Código:</b> I ___ -1 _____	<b>Nome:</b> Modelagem Molecular I
<b>Créditos:</b> 2	<b>Carga Horária:</b> 30

**DEPARTAMENTO DE:**

**INSTITUTO DE:**

**PROFESSOR(ES):** Nome completo sem abreviações e matrícula SIAPE (UFRRJ) ou se de instituição de pesquisa o CPF. Endereço eletrônico para contato.

**OBJETIVOS:** Apresentar objetivo geral e/ou específico da disciplina. Este item pode ser exigido em alguns Programas de pós-graduação de forma mais extensa.

**EMENTA:** Modelos de Campo de Força Empírico: Mecânica Molecular. Teoria. Modelos de Campo de Força Empírico. Experimental. Modelos Quanto-Mecânicos. Teoria. Modelos Quanto-Mecânicos. Experimental.

**CONTEÚDO PROGRAMÁTICO:**

1. Discriminar os temas apresentados na ementa na forma de itens e subitens.
2. O conteúdo programático pode e deve ser atualizado com frequência pelos professores, mantendo a obrigatoriedade de abordar os temas apresentados na ementa.
3. O programa deve ser adequado ao número de créditos da mesma e pode envolver atividades extraclases com supervisão do professor responsável ou colaboradores eventuais, que são consideradas na carga horária adicional de 30 a 45 horas-aula por crédito prático.

**METODOLOGIA:**Item exigido em alguns Programas de Pós-graduação.

**BIBLIOGRAFIA:** (usar normas ABNT para as citações)

**BÁSICA:**

- A. Leach, “Computational Chemistry: Principles and Applications”. 2a Edição. Prentice Hall, 2001, New York.
- F. Jensen, “Introduction to Computational Chemistry”. John Wiley & Sons, 1999, New York.
- T. Clark, “Handbook of Computational Chemistry: a Practical Guide to Chemical Structure and Energy Calculations”. John Wiley & Sons, 1985, New York.
- G. H. Grant & W. G. Richards, “Computational Chemistry”. Oxford Science Publications, 1995, Oxford.
- U. Burkert, & N. L. Allinger, “Molecular Mechanics”, ACS Monograph 177. American Chemical Society, 1982, Washington, D.C.

- J. J. P. Stewart, "MOPAC, a Semiempirical Molecular Orbital Program". J. Comp.-Aided Mol. Des. 4(1) (1990) 1-105.

**COMPLEMENTAR:** Outras publicações disponíveis através do docente ou em bibliotecas que o aluno tenha acesso livre.

**PERÍODICOS CIENTÍFICOS E OUTROS:** O conteúdo do programa deve ser respaldado por bibliografia adequada e atual, que inclua periódicos e textos científicos de revisão relevantes na subárea de conhecimento da disciplina.