



---

## **Mini-curso Prático**

### **Métodos semi-empíricos de Química-Quântica**

#### **Objetivo**

Este mini-curso tem como objetivo apresentar os aspectos práticos do uso dos métodos semiempíricos de química quântica para modelagem molecular de sistemas químicos e biológicos.

#### **Ementa**

1. Apresentação Introdutória do Formalismo dos Métodos Semi-empíricos
2. Parametrização dos Métodos Semi-empíricos
3. Cálculo de Biomoléculas: Método MOZYME
4. Apresentação dos Programas
  - a. Gabedit
  - b. MOPAC 2012
5. Atividades práticas
  - a. Reação Isodésmica
  - b. Análise Conformacional de Ciclohexanos Substituídos
  - c. Propriedades Eletrônicas de Proteínas

#### **Bibliografia utilizada**

- Introduction to Computational Chemistry, F. Jensen (1999)
- Approximate Molecular Orbital Theory, John A. Pople (1970)
- Modern Quantum Chemistry, Attila Szabo e Neil S. Ostlund (1996)
- Stewart, J. J. P. International Journal of Quantum Chemistry 1996, 58, 133–146.
- Zalesny, R.; Mezey, P. G.; Papadopoulos, M. G.; Leszczynski, J. Linear-Scaling Techniques in Computational Chemistry and Physics; Zalesny, R.; Papadopoulos, M. G.; Mezey, P. G.; Leszczynski, J., Eds.; Springer Netherlands: Dordrecht, 2011.
- Stewart, J. J. P. MOPAC web site 2012. [Http://openmopac.net](http://openmopac.net).
- Allouche, A.-R. Journal of computational chemistry 2011, 32, 174–82.