



PLANO DE DESENVOLVIMENTO DE DISCIPLINA

1º Semestre 2024

Disciplina	
Código	Nome
QF939	Tópicos Especiais em Físico-Química X - Introdução à Computação Quântica aplicada à Química

Turmas	Horário	Local
A	Qua: 14/16	IQ03

Docentes

Nelson Henrique Morgon (nhmorgon@unicamp.br) – Bloco H / Sala 315 – Ramal 13157
Rene Nome (nome@unicamp.br) - Sala I-132 / Laboratório I-130 – Ramal 1 3144

Forma de Condução/Organização da Disciplina e das Avaliações

Descrição: Aulas expositivas em sala, atividades em computador voltadas à elaboração e desenvolvimento de projeto definido previamente. Uma avaliação no final do semestre com a entrega do projeto previamente definido.

Prazos de Entrega das Atividades e dos Resultados das Avaliações

Descrição: Ao final do semestre letivo.

Critérios de Avaliação e Aprovação

Descrição detalhada do método para o cálculo da média parcial e da nota final (que combine a média parcial e nota do exame)

Nota de 5 a 10 no projeto apresentado ao final do semestre letivo. O mesmo será desenvolvido ao longo do semestre, durante as aulas. Esse procedimento é uma garantia que todos os alunos serão avaliados continuamente, de modo que ao final do semestre a entrega do projeto e sua conclusão será mera formalidade.

Forma de Atendimento Extra-Classe

Descrição: Agendamento prévio, pessoalmente ou via e-mail.

Calendário	
Data	Atividade
28/02	Introdução à Computação Quântica: Aspectos Históricos, conceitos fundamentais, tipos
06/03	Introdução (Revisão) à Química Quântica e Computacional.

13/03	Ferramentas: Python, Ambiente Jupiter, QISKIT. ... Instalação de Programas, Definição de ambientes de trabalho.
20/03	Espectroscopia RMN (Esfera de Bloch), Eletrônica (UV/Vis), e Resolvida no Tempo.
27/03	Métodos teóricos: Variacional, Perturbativo, HF e Coupled Cluster.
03/04	Álgebra Linear: Expansão em Base, Transformação Unitária, Vetor, Tensor, Produto Interno visando introdução a GATES
10/04	Interferência, Coerência, Enlaçamento (Emaranhamento) e Sobreposição.
17/04	GATES (X, Y, Z, NOT, CNOT, AND, Hadamard,)
24/04	Erros, Ruídos associados ao computador quânticos, ... definições e métodos mitigação.
08/05	Construção de curva de energia potencial para moléculas diatômicas (HLi, HF, F2, ...) usando pacotes de estrutura eletrônica.
15/05	Atividades práticas: Construção de circuitos quânticos, geração e análise de outputs, gráficos, esfera de Bloch, operações xyz em esfera de Bloch,
22/05	Variational Quantum Eigensolver (VQE)
29/05	Construção de curva de energia potencial para moléculas diatômicas (H2 e HLi, He2, ...) usando pacotes de estrutura eletrônica em ambiente de simuladores de computadores quânticos.
05/06	Avaliação Final – Salvar o Notebook (Ambiente do Jupiter) – Entrega do Projeto.

Art. 58 do Regimento Geral de Graduação: O Exame deverá ser realizado no período previsto pelo Calendário Escolar e deverá estar agendado para o mesmo dia da semana e horário em que são ministradas as aulas da disciplina, exceto na ocorrência de feriado ou ponto facultativo.

10 a 14/02 - Feriado/Expediente Suspenso - Não haverá atividades
28 a 30/03 - Feriado/Expediente Suspenso - Não haverá atividades
01/05 - Feriado/Expediente Suspenso - Não haverá atividades
21/05 - Avaliação e discussão de cursos - Não haverá aula
30 e 31/05 - Feriado/Expediente Suspenso - Não haverá atividades
01/06 - Feriado/Expediente Suspenso - Não haverá atividades
01 a 06/07 - Semana de Estudos
08 e 09/07 - Feriado/Expediente Suspenso - Não haverá atividades
10 a 16/07 - Semana de Exames

Outras informações relevantes

(1) Art. 56 do Regimento Geral de Graduação: São condições para aprovação: II - nas disciplinas em que nota e frequência são adotadas como forma de avaliação – obter **nota final** igual ou superior a 5,0 (cinco vírgula zero) e a frequência mínima estabelecida para a disciplina no Catálogo dos Cursos de Graduação; a frequência mínima de 75%.

(2) **Sobre o Abono de Faltas:** os critérios do Abono de Faltas são definidos pelo artigo 72, do Regimento Geral de Graduação.

(3) De acordo com a **Deliberação CG 2022/01** sobre **PROVA SUBSTITUTIVA EM CASO DE FALTA JUSTIFICADA POR COVID-19**, a CG estabelece que o exame final poderá substituir a avaliação no dia de faltas abonadas pelo inciso V do artigo 72, exceto se o(a) estudante comprovar que a ausência foi motivada por suspeita ou contágio por COVID-19. Nessas situações – suspeita ou contágio comprovado por COVID-19 – o(a) estudante terá direito a reposição da atividade avaliativa, desde que componha sua média final, em data a ser combinada com o docente responsável, não podendo a prova de exame final ser utilizada para fins de substituição.

(4) Quaisquer alterações no PDE, propostas pelo(a) Docente ou Discentes, no transcorrer do semestre, só poderão ser realizadas mediante a concordância do(a) Docente e Discentes, e autorização da Comissão de Graduação.

SEGUEM A EMENTA, PROGRAMA E BIBLIOGRAFIA



UNIVERSIDADE ESTADUAL DE CAMPINAS
INSTITUTO DE QUÍMICA

PROGRAMAS E BIBLIOGRAFIAS



1º semestre de 2024

Disciplina Eletiva	
Código	Nome
QF939	Introdução à Computação Quântica aplicada à Química
Vetor	
OF:S-6 T:002 P:000 L:000 O:000 D:000 HS:002 SL:002 C:002 AV:N EX:S FM:75%	
DISCIPLINA SERÁ MINISTRADA JUNTAMENTE COM A PÓS-GRADUAÇÃO	
Pré-Req	Nenhum
Docentes	Nelson Henrique Morgon (COORD.); Rene Nome
Ementa	
Introdução à Computação Quântica, Revisão de Química Quântica, Ambientes de programação em computação quântica, VQE e Aplicações em átomos e moléculas diatômicas.	
Programa	
Introdução à Computação Quântica: Aspectos Históricos, conceitos fundamentais, tipos.	
Introdução (Revisão) à Química Quântica e Computacional.	
Ferramentas: Python, Ambiente Jupiter, QISKIT. ... Instalação de Programas, Definição de ambientes de trabalho.	
Espectroscopia RMN (Esfera de Bloch), Eletrônica (UV/Vis), e Resolvida no Tempo.	
Métodos teóricos: Variacional, Perturbativo, HF e Coupled Cluster.	
Álgebra Linear: Expansão em Base, Transformação Unitária, Vetor, Tensor, Produto Interno visando introdução a GATES.	
Interferência, Coerência, Enlaçamento (Emaranhamento) e Sobreposição.	

GATES (X, Y, Z, NOT, CNOT, AND, Hadamard,)

Erros, Ruídos associados ao computador quânticos, ... definições e métodos mitigação.

Construção de curva de energia potencial para moléculas diatômicas (HLi, HF, F2, ...)

usando pacotes de estrutura eletrônica.

Atividades práticas: Construção de circuitos quânticos, geração e análise de outputs, gráficos, esfera de Bloch, operações xyz em esfera de Bloch, ...

Variational Quantum Eigensolver (VQE)

Construção de curva de energia potencial para moléculas diatômicas (H₂ e HLi, He₂, ...) usando pacotes de estrutura eletrônica em ambiente de simuladores de computadores quânticos.

Avaliação Final – Salvar o Notebook (Ambiente do Jupiter)

Bibliografia

Nenhuma bibliografia específica, mas textos que contemplem Computação Quântica, Aplicações em Química, Métodos de Estrutura Eletrônica e de Simulação Molecular, Programação em Python

Material para consulta será fornecido durante as aulas.

Critérios de Avaliação

Critérios de avaliação definidos pelo Professor, com base no disposto na Seção I – Normas Gerais, Capítulo V – Da Avaliação do Aluno na Disciplina, do Regimento Geral de Graduação. Frequência: 75 % (* O abono de faltas será considerado dentro do previsto no capítulo VI, seção X, artigo 72 do Regimento Geral de Graduação)