



PLANO DE DESENVOLVIMENTO DE DISCIPLINA

1º Semestre 2025

Disciplina	
Código	Nome
QO859	Química Orgânica Computacional Aplicada

Turmas	Horário	Local
A	seg 21/23	SI08

Docentes

Rodrigo Cormanich, cormanich@unicamp.br, Sala I-223

Forma de Condução/Organização da Disciplina e das Avaliações

Descrição: As aulas serão ministradas presencialmente, assim como as avaliações. A frequência mínima estabelecida para a aprovação na disciplina é de 75%.

Prazos de Entrega das Atividades e dos Resultados das Avaliações

Descrição: Serão entregues após todas as apresentações dos alunos ao final da disciplina.

Critérios de Avaliação e Aprovação

A avaliação será única e irá consistir de apresentação de um pequeno projeto de Química Computacional pelos alunos ao final da disciplina. As notas para a pós-graduação no projeto serão distribuídas de acordo com o seguinte:

- A – Média final (MF) $\geq 8,0$
- B – MF $\geq 7,0$
- C – MF $\geq 5,0$
- D – MF $< 5,0$
- E – Abandono / Reprovado por frequência

Para a graduação serão considerados os seguintes critérios:

- Se MF $\geq 5,0$ → Aprovado
- Se MF $< 5,0$ → Reprovado

Forma de Atendimento Extra-Classe

Descrição: Podem ser marcados horários de atendimento com o professor e/ou PED responsável pela disciplina.

Calendário

Data	Atividade
01 a 05/03	Feriado/Expediente Suspenso - Não haverá atividades
10/03	Primeira aula da disciplina

17 a 21/04 - Feriado/Expediente Suspenso - Não haverá atividades
01 a 03/05 - Feriado/Expediente Suspenso - Não haverá atividades
20/05 - Avaliação e discussão de cursos - Não haverá aula
19 a 21/06 - Feriado/Expediente Suspenso - Não haverá atividades
07 a 12/07 - Semana de Estudos
09/07 - Feriado/Expediente Suspenso - Não haverá atividades
14 a 19/07 - 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) 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

Código: QO859								
Nome: Química Orgânica Computacional Aplicada								
Nome em Inglês: Applied Computational Organic Chemistry								
Nome em Espanhol: Química Orgánica Computacional Aplicada								
Tipo de Disciplina: Semanal								
Tipo de Aprovação: Nota e Frequência								
Característica: Regular								
Frequência: 75%								
Tipo de Período / Período de Oferecimento: Semestral / A critério da Unidade de Ensino								
Exige Exame: Sim								
Vetores								
T	L	P	O	PE	OE	SL	SEMANAS	CRÉDITO
2	-	-	-	-	-	2	15	2
Ocorrência nos Currículos:								
Pré-requisitos: QO521 ou QO327 ou QO323 ou QO421								
Docente: Rodrigo Antonio Cormanich								
Ementa: Métodos em Química Computacional, Softwares, Básico de Linux e programação, Cálculos de energia, otimização e frequência, superfícies de energia potencial, barreiras de energia e de rotação, análise conformacional, estudos de reações em química orgânica, cálculos de estados de transição e IRC, cálculos de obtenção de propriedades eletrônicas e espectroscópicas, cálculos baseados em orbitais moleculares e densidade eletrônica, cálculos teóricos para entendimento de estrutura e reatividade de compostos orgânicos.								
Programa:								
<ol style="list-style-type: none"> 1. Softwares de cálculos computacionais e interfaces gráficas. 2. Métodos de química computacional: MM, SE, ab initio e DFT. 3. Superfícies de energia potencial e cálculos de otimização e frequência 4. Introdução à comandos básicos e programação no Linux 5. Análise conformacional de moléculas orgânicas 6. Cálculos de parâmetros espectroscópicos 7. Estudos de reações orgânicas simples utilizando-se cálculos teóricos 8. Métodos interpretativos da função de onda baseados em orbitais moleculares 9. Métodos interpretativos da função de onda baseados em densidade eletrônica 								
Bibliografia Básica								
<ol style="list-style-type: none"> 1) Material disponibilizado pelo professor. 2) JENSEN, F. Introduction to Computational Chemistry: John Wiley & Sons, 2a Ed., 2007. 3) HEHRE, W. J.; SHUSTERMAN, A. J.; NELSON, J. E. The Molecular Modelling Workbook for Organic Chemistry, 6th Ed., Prentice Hall, 2005. 								
Bibliografia complementar								
<ol style="list-style-type: none"> 1) LEWARS, E. Computational Chemistry: Introduction to the Theory and Applications of Molecular and Quantum Mechanics, Kluwer Academic Publishers, 2004 2) WEINHOLD, F. Valency and Bonding: A Natural Bond Orbital Donor-Acceptor Perspective, University of Wisconsin, Madison, Clark R. Landis, University of Wisconsin, Madison 2009 3) FORESMAN, J. B; A. Frisch Exploring Chemistry with Electronic Structure Methods, 3rd ed., Gaussian, Inc.: Wallingford, CT, 2015. 4) BADER, R. F. W. Atoms in Molecules: A Quantum Theory, Oxford University Press, 1994. 5) CREMER, C. J. Essentials of Computational Chemistry: Theories and Models, 2nd Ed., Wiley, 2004. 								