



UNIVERSIDADE ESTADUAL DE CAMPINAS
INSTITUTO DE QUÍMICA
PLANO DE DESENVOLVIMENTO DE DISCIPLINA



2º Semestre 2025

Disciplina	
Código	Nome
QF-852	Modelagem Molecular

Turmas	Horário	Local
A	4a-feira (14-16 hs)	Laboratório de Informática (PB) - Sala SI08

Docentes

Miguel San-Miguel (Coordenador),
Sala H-309b, Ramal 13441
smiguel@unicamp.br

Diego Pereira Dos Santos
santosdp@unicamp.br

Leandro Martínez
lmartine@unicamp.br

Pedro Antônio Muniz Vazquez
vazquez@unicamp.br

Forma de Condução/Organização da Disciplina e das Avaliações

A disciplina será estruturada em quatro blocos de conteúdo, cada um ministrado por um dos docentes responsáveis. As aulas ocorrerão em sala de informática, equipada com computadores que permitirão aos estudantes acompanhar em tempo real as exposições dos docentes, bem como realizar as atividades práticas propostas. Parte dessas atividades terá caráter avaliativo, sendo utilizadas para aferir o desempenho e o aproveitamento dos estudantes ao longo do curso.

Prazos de Entrega das Atividades e dos Resultados das Avaliações

Cada docente estabelecerá para cada atividade um prazo de entrega de acordo com as exigências da própria atividade.

CrITÉRIOS de Avaliação e Aprovação

A disciplina está organizada em quatro blocos de conteúdo, cada um ministrado por um dos docentes responsáveis. Em cada bloco, os estudantes realizarão uma atividade avaliativa (relatório, exercício prático, prova ou projeto curto), com nota atribuída de 0 a 10.

A média parcial (MP) será calculada como a média aritmética simples das notas obtidas nos quatro blocos:

$$MP = (N1 + N2 + N3 + N4) / 4$$

Onde:

N1, N2, N3 e N4 são as notas atribuídas nos blocos 1, 2, 3 e 4, respectivamente.

Caso a média parcial seja maior ou igual a 5,0, o aluno será considerado aprovado, desde que tenha frequência mínima conforme o regimento da instituição.

Se a média parcial for entre 2,5 e 4,9, o estudante poderá realizar o exame final (EF).

A nota final (NF) será calculada como a média aritmética entre a média parcial e a nota do exame final:

$$NF = (MP + EF) / 2$$

O aluno será aprovado se a nota final for igual ou superior a 5,0.

Forma de Atendimento Extra-Classe

Horários para a discussão de dúvidas com cada docente poderão ser agendados, caso necessário.

Calendário

Data	Atividade
06/08/2025	Apresentação da disciplina
13/08/2025	Aula 1 – Prof. Pedro
20/08/2025	Semana da Química - não haverá aula
27/08/2025	Aula 2 – Prof. Pedro
03/09/2025	Aula 3 – Prof. Pedro
10/09/2025	Aula 4 – Prof. Pedro
17/09/2025	Aula 5 – Prof. Leandro
24/09/2025	Aula 6 - Prof. Leandro
01/10/2025	Aula 7 - Prof. Leandro
08/10/2025	Aula 8 - Prof. Miguel
15/10/2025	Avaliação e discussão de cursos - Não haverá aula
22/10/2025	Aula 9 - Prof. Miguel
29/10/2025	Aula 10 - Prof. Miguel
05/11/2025	Aula 11 - Prof. Diego
19/11/2025	Aula 12 - Prof. Diego
26/11/2025	Aula 13 - Prof. Diego
03/12/2025	Semana de Estudos
10/12/2025	Exame

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.

18 a 22/08 - Semana da Química - não haverá aula para as disciplinas dos cursos 05/50.

15/10 - Avaliação e discussão de cursos - Não haverá aula

27 e 28/10 - Feriado/Expediente Suspenso - Não haverá atividades

15/11 - Feriado/Expediente Suspenso - Não haverá atividades

20 a 22/11 - Feriado/Expediente Suspenso - Não haverá atividades

01 a 06/12 - Semana de Estudos

08/12 - Feriado/Expediente Suspenso - Não haverá atividades

09 a 15/12 - 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.

(4) Conforme a Instrução Normativa CCG nº 02/2025, o Docente poderá atribuir nota zero a atividades em que forem identificados elementos que comprometam sua lisura, com o devido registro e fundamentação.

(5) **INSTRUÇÃO NORMATIVA CCG Nº 02/2025 Cláusula de Honestidade e Lisura Acadêmica:**

Todas as atividades relacionadas às disciplinas devem ser realizadas em conformidade com as orientações fornecidas pelos docentes e com o devido rigor ético.

Caso o(a) docente responsável, no exercício de sua liberdade de cátedra, forme convicção acerca da ausência de lisura ou de condições adequadas para a realização da atividade avaliativa, poderá atribuir nota zero, seja para a atividade única ou, conforme o caso, para o conjunto de atividades do semestre. A ocorrência deverá ser fundamentada e comunicada à Coordenação de Curso de Graduação, podendo o(a) estudante estar sujeito a processo administrativo.

SEGUEM A EMENTA, O PROGRAMA E A BIBLIOGRAFIA

Código: QF852								
Nome: Modelagem Molecular								
Nome em Inglês: Molecular Modelling								
Nome em Espanhol: Modelización Molecular								
Tipo de Disciplina: Semanal								
Tipo de Aprovação: Nota e Frequência								
Característica: Regular								
Frequência: 75%								
Tipo de Período / Período de Oferecimento: Semestral / Todos os períodos								
Exige Exame: Sim								
Vetores								
T	L	P	O	PE	OE	SL	SEMANAS	CRÉDITO
2	-	-	-	-	-	2	15	2
Ocorrência nos Currículos:								
Pré-requisitos:								
Ementa: Introdução aos métodos de simulação computacional; descrição de modelos atômicos e moleculares; reatividade química; sistemas biológicos; sólidos e materiais.								
Programa:								
A. Introdução à química computacional								
Modelos atômicos e moleculares (métodos ab initio, semiempíricos e da DFT) .								
Propriedades eletrônicas e moleculares.								
Aplicações.								
B. Sistemas biológicos								
Campos de força.								
Simulações de dinâmica molecular.								
Aplicações.								
C. Sólidos e materiais								
A química computacional na Nanociência.								
A revolução da Teoria do Funcional da Densidade.								
Aplicações.								
Bibliografia Básica								
1) MORGON, N.; COUTINHO, K. Métodos De Química Teórica E Modelagem Molecular 1 Ed. São Paulo: Livraria da Física, 2007. 539 p.								
2) LEACH, A.R. Molecular Modelling – Principles and Applications 2 Ed. Harlow: Prentice Hall, 2001. 744 p.								
3) JENSEN, F. Introduction to Computational Chemistry 1 Ed. Chichester: Wiley, 1999. 429 p.								
Bibliografia Complementar								
1) JENSEN, F. Molecular Modeling Basics 1 Ed. Boca Raton: CRC Press, 2010. 166 p.								
2) ROGERS, D.W. Computational Chemistry using the PC 3 Ed. Hoboken: John Wiley & Sons, 2003. 349 p.								
3) FRENKEL, D.; SMIT, B. Understanding Molecular Simulation . 1 Ed. San Diego: Academic Press, 1996. 443 p.								
4) LEWARS, E. Computational Chemistry. Introduction to the Theory and Applications of Molecular and Quantum Mechanics . 1 Ed. Norwell: Kluwer Academic Publishers, 2003. 471 p.								
5) CRAMER, C.J. Essentials of Computational Chemistry . 2 Ed. Chichester: Wiley, 2004. 596 p.								