

Química Computacional

2024-2025

Paulo J. Costa

Faculdade de Ciências da Universidade de Lisboa
Computational Chemistry & Molecular Interactions Lab

Aula Prática - Introdução



Objectivos

- Familiarização com a linguagem de programação *python* e sua aplicação em química computacional
- Resolução de exercícios em química computacional
- Demonstração de cálculos de estrutura electrónica (mecânica quântica), Dinâmica Molecular e Monte Carlo

Métodos de Avaliação

- Nota Teórica - Exame (50 %)
- Nota Prática - Notebooks, trabalhos, participação, assiduidade (50 %)

A aprovação à disciplina pressupõe a aprovação **a ambas as componentes (> 9.5 valores)**

Avaliação Prática

- Resolução e entrega dos notebooks preenchidos + problemas
- Resolução e entrega dos exercícios de avaliação (*python*, aplicações)

A entrega poderá ser feita até à aula seguinte. Notebooks enviados por email; resolução dos problemas por email (scan) ou em papel

Abrir um notebook no Google Colab

Source: <https://www.geeksforgeeks.org/getting-started-with-google-colab/>



