



Química Orgânica Essencial



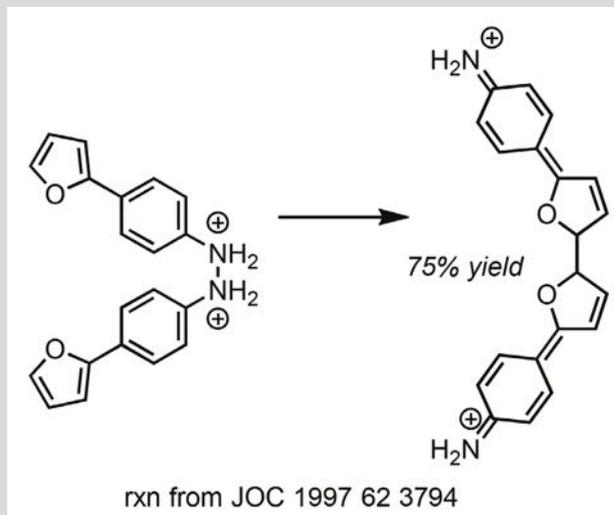
Pensado para ensinar química orgânica, este *site* agrega uma coleção de cerca de 300 reações de química orgânica retiradas da literatura. Com financiamento da *Research Corporation for Science Advancement*, o Prof. Dennis D. Cao, *Macalester College*, desenvolveu esta base de dados com o objetivo de fornecer problemas práticos aos estudantes, usando exemplos reais. A seleção contempla casos com diversos níveis de dificuldade, dos mais simples aos complexos, ao nível de exame. Esta iniciativa permite inspirar professores para as suas aulas e também ajudar os alunos no estudo desta (para muitos fascinante!) química. O autor do *site* escreveu recentemente um artigo sobre este projeto (D. D. Cao, *J. Chem. Educ.* **2022**, 99, 3049–3052. DOI: 10.1021/acs.jchemed.2c00424).

Veja mais em realorganicchemistry.org

>

Vasco Bonifácio

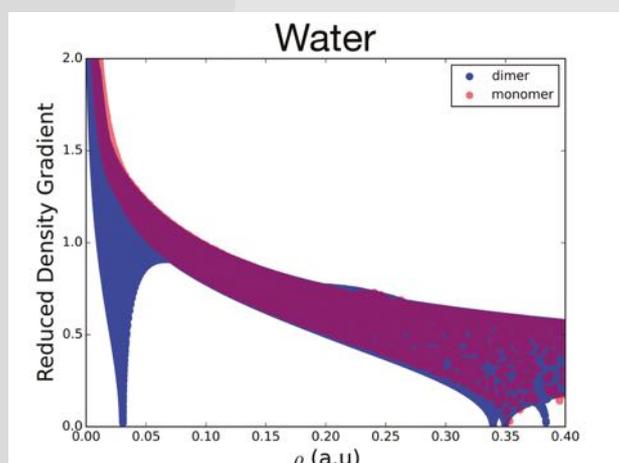
vasco.bonifacio@tecnico.ulisboa.pt



Exemplo de uma reação pericíclica.
@realorganicchemistry.



Química Quântica Mais Fácil



Estudo das interações não covalentes na molécula da água. @chemtools.

O *ChemTools* é uma biblioteca Python gratuita e de código aberto para interpretar os resultados de cálculos de química quântica. O objetivo do *ChemTools* é fornecer uma caixa de ferramentas para expressar em linguagem química os resultados quantitativos dos cálculos teóricos de estruturas eletrônicas. Fornece ainda uma funcionalidade fácil de usar para calcular descritores fundamentais da química quântica conceptual, juntamente com um conjunto de utilitários, permitindo assim que os cientistas testem facilmente as suas próprias descobertas. A versão atual do *ChemTools* compreende ferramentas conceptuais associadas, ou pelo menos inspiradas, na teoria da funcional da densidade (*density-functional theory, DFT*) e na teoria da matriz densidade (*density-matrix theory*). No futuro, está prevista a inclusão de ferramentas baseadas em orbitais, métodos teóricos da informação e vários tipos de população e análise de ligação e topologia química quântica (incluindo a teoria quântica de átomos em moléculas, QTAIM).

Veja mais em chemtools.org

>

Vasco Bonifácio

vasco.bonifacio@tecnico.ulisboa.pt