

Apresentação de Trabalhos/Pôsteres dia 18/09

ID	Trabalho	Nome
17353	Electronic Structure of MoS2 and WS2 Nanotubes	Rafael de Alencar Rocha
17355	Charge Transport in C60 Crystals: A Tight-Binding Description	Marcelo Lopes Pereira Júnior
17357	MoS2/WS2 In-Plane Heterojunctions: A Theoretical Insight into the Electronic Structure	Tainá de Sousa Oliveira
17360	Polaron Dynamics in Pentathienoacenes	Rayane Tayná da Costa Torres
17364	Charge Transport in Rubrene-Based Crystals	Hudson Rodrigues Armando
17366	Exciton Diffusion in Bulk Heterojunction Solar Cells: A Kinetic Monte Carlo Study	Willian Fábio Radel
17372	Relações de Estrutura Atividade e Análise Multivariada para Inibidores da Acetilcolinesterase	Alessandra Sofia Kiametis Wernik
17374	Estudo teórico da adsorção de metanol, etanol, 1-propanol e 1-butanol em zeólitas H-ZSM-5	Rogério José da Costa
17375	Estudo teórico da adsorção de gás de síntese em MgO e ZnO	Rogério José da Costa
17388	Cálculos das Constantes Espectroscópicas e do Tempo de Vida dos Complexos Formados por Metanol e Gases Nobres	Romário Sousa Silva
17444	DFT studies of gas hydrate formation	Daniel Garcez Santos Quattrociochi
17449	Distribuição Angular das Seções de Choque da Reação H + Li2 : um Estudo Convergado de Espalhamento Quântico Independente do Tempo	Henrique Vieira Rivera Vila
17453	Electronic Structure of In-Plane Graphene/h-BN Heterojunctions	Ramiro Marcelo Dos Santos
17484	Interaction energy calculation in Azaacenes type molecular crystals applied in organic electronics.	Sara Santiago de Brito
17491	DFT+U Hubbard parameters for Ti and V on anatase supercells	Gustavo Olinto da Silva
17492	V and N doping on the surface of TiO2: DFT-GGA study	Gustavo Olinto da Silva
17514	A Computational Study of the Acid Dissociation in the Sulfonamide Group	Fernando Marques Carvalho
17519	Characterization of Polarons in Armchair Graphene Nanoribbons	Marcelo Macedo Fischer
17528	Estudos DFT e CASSCF da ligação de coordenação M-CO	Marina Pelegrini
17532	STUDY OF THE EFFECT OF THE AQUEOUS SOLVATION ON THE GEOMETRIC PARAMETERS OF THE MELATONIN USING CAR-PARRINELLO MOLECULAR DYNAMICS	Allane Catharina Carvalhaes Rodrigues
17535	A Biexciton Model for Exciton-Exciton Interactions in Para-hexaphenyl	Leonardo Evaristo de Sousa
17538	Simulando Mobilidades de Carga em Cristais Moleculares	Ingrid Gomes Ribeiro

17539	Cálculo da Transferência de cargas em complexos envolvendo Sulfeto de Hidrogênio e Gases nobres	Alan Leone de Araújo Oliveira
17540	Estudo da estrutura eletrônica e da geometria da molécula Bromo-chalcona Sulfonamida utilizando Teoria do Funcional da Densidade.	Fernanda Borges Carvalho
17541	Estudo sobre correlação entre temperatura e dinâmica de éxcitons em cristais de AlQ3	Marina Pinheiro Dourado
17548	CORELATION 13C CHEMICAL SHIFT FOR OSELTAMIVIR	Leonardo Buss Wulff
17563	Correções zpva para as segundas hiperpolarizabilidades de clusters (MgO)n	Luan da Silva Feitoza
17553	Estudo sobre a síntese de nanopartículas de ouro e nanocompósitos plurônicos tribloco em condições ambientes	Aline Beatriz da Silva Santos
17967	A DFT study of hydroxyapatite (001) surface	Albert F. B. Bittencourt
17365	Electronic Structure of MoSe2/Graphene Van der Waals Heterostructures: an ab-initio Study	Weverson Lucas Aguiar de Paula Silva
17581	A join theoretical and experimental approach of electronic structure and photocatalytic properties of MgWO4 powders	Amanda Fernandes Gouveia
17356	Gas-Sensing Properties of Noble Metal Decorated Carbon Nanotubes	Kleuton Antunes Lopes Lima

Apresentação de Trabalhos/Pôsteres dia 19/09

ID	Trabalho	Nome
17542	A influência dos grupos amino e hidroxila no arranjo supramolecular de duas trimetoxi-chalconas	Igor Dalarmelino Borges
17543	Electron-Phonon Coupling in Silicene Nanoribbons	Jailson Gomes da Silva
17546	Theoretical pKa prediction of halogenated compounds in aqueous solution using an implicit solvation model	Bruna Luana Marcial
17801	Interações das Interfaces do Complexo Ternário entre o Inibidor de Bowman-Birk BTCl e a quimotripsina e a tripsina avaliadas por meio de cálculos semi-empírico	Diego Elias Honda
17551	Collision-Induced Absorption spectra from first principles at 300 K by molecular H2 pairs	Thais Forest Giacomello
17554	Superfícies de Hirshfeld na interpretação das interações moleculares do Produto Natural C16 H20 O5	Mary Hellen da Costa Monteiro
17556	Chemical bond overlap properties obtained from localized molecular orbitals and the concept of covalency	Renaldo Tenório de Moura Júnior
17558	Calculations of 31P NMR chemical shifts in phosphorus compounds: correlations between theory and experiment	Mayrla Letícia Alves de Oliveira
17560	NMR 13C CHEMICAL SHIFT FOR EFAVIRENZ	Gustavo da Silva Do Prado
17562	Utilização Do Modelo Do PCM Para A Inclusão Do Efeito Do Solvente No Estudo De Propriedades Magnéticas De Polifenóis	Agnes Jalowitzki Silva
17564	Análise da superfície de Hirshfeld e o efeito de solvente nas geometrias de dois derivados de tiazina	André Duarte da Silva

17565	Theoretical calculation of ¹³ C NMR chemical shifts using scale factors	Mariana Aparecida de Souza Martins
17566	Estudo Estrutural de Complexo de Cobre(II) com Ligante Hidrazona	Eduardo de Assis Duarte
17567	Avaliação da teoria de ordem reduzida G3(MP2)//B3 com bases de Dunning em cálculos de afinidade protônica	Gerlane Bezerra da Silva
17569	Dinâmica de quase-partículas supersônicas em um polímero do tipo Poly(Phenylene Vinylene) (PPV)	Fabio Luis de Oliveira Paula
17572	Estudo in silico de benzimidazois utilizados em agricultura em relação a aspectos medicinais	Paulo Henrique Peruquetti
17576	Mapeamento eletrônico e estudo estrutural de inibidores da Tirosina Quinase Abl-Bcr.	Washington Almeida Pereira
17579	Theoretical Modeling of Ammonia Sensors: Interaction Between Ammonia and Nickel Phthalocyanine	Tamires Lima Pereira
17580	Molecular Docking of molecules isolated from Malvaceae family focusing in the development of antithrombotic agents	Sidney Ramos de Santana
17582	Estudo de estrutura eletrônica da Tripsina.	Érica
17584	estudo teórico de nanotubos de silício em conformações armchair e zigzag	Pedro Simão Sousa Mendonça
17590	Kinetic Monte Carlo Study of Hole Transport in Pentacene and its Derivatives	Dénis da Mata Oliveira
17599	Reaction Rate of H ₂ CO + H ₂ + CO via TST	Henrique de Oliveira Euclides
17602	Quantum Chemistry Calculations for interaction between H ₂ O-HX and H ₂ O-X ₂ systems, with X=H, F, Cl, Br atoms using SAPT Method	Ana Claudia Pinheiro da Silva Cruz
17603	Systematic study on charge transport and spectroscopic properties: A DFT Benchmark of LCD's molecules	Sidney Ramos de Santana
17605	Same polarity polaron and bipolaron scattering on conducting polymers	Maurício Bellissimo Falleiros
17607	Estudo da viscosidade absoluta de soluções aquosas de F127 e sua influência no diâmetro hidrodinâmico de nanocompósitos AuNP-F127	Aline Beatriz da Silva Santos
17649	Dipole Moment of Urea Molecule on Gas Phase and Solvent	Antonio Luiz de Almeida
17650	Chemical Shift Anisotropy of the Mg on (MgO) 18 and Urea/(MgO)18	Antonio Luiz de Almeida
17670	Analytical Potential Energy Curve of Fullerenes Dimers Using the Girifalco's Potential	Luciano Ribeiro
17784	Magnetic brightening of dark excitons and its dynamics in monolayer WSe ₂	Railson da Conceição Vasconcelos