



Caderno de Programação

VII Simpósio de Estrutura Eletrônica e Dinâmica Molecular

Brasília, 17 – 21 de setembro de 2018

Local: Vila Velluti Hotel, Spa e Convenções

REALIZAÇÃO:

Universidade de Brasília

Universidade Estadual de Goiás

Universidade Federal de Goiás

Bem-vindos ao

VII Simpósio de Estrutura Eletrônica e Dinâmica Molecular – SeedMol

Sejam bem-vindos à sétima edição do Simpósio de Estrutura Eletrônica e Dinâmica Molecular, promovido pela Universidade de Brasília, Universidade Estadual de Goiás e Universidade Federal de Goiás. Pela primeira vez o evento ocorrerá em Brasília, no Vila Velluti Spa e Convenções, no período de **17-21 de setembro** de 2018. Este Simpósio ocorre a cada dois anos e objetiva oferecer uma visão ampla do estado da arte, novos rumos e aplicação da química teórica e computacional. No escopo do Simpósio estão tópicos que vão desde o desenvolvimento até a aplicação da ciência computacional em química, biologia, química medicinal, bioquímica, farmacologia, estado sólido, catálise, e campos correlatos.

As participações de 130 inscritos e o aceite de 99 resumos confirmam a consolidação do evento, que nesta edição conta com 10 conferências, 07 minicursos e 25 palestras. Entre os palestrantes e conferencistas figuram pesquisadores brasileiros e de outras nacionalidades, cujas expertises são objeto de admiração geral. O VII SeedMol possibilitará a publicação de trabalhos completos no periódico *Journal of Molecular Modeling*. Além disso, todos os resumos serão publicados com DOI e os Anais do evento terão ISBN.

Para a realização deste evento, num período em que a ciência e a pesquisa científica no Brasil estão sendo sacrificadas e sofrendo sucessivos cortes nas verbas de financiamento, foi de fundamental importância o apoio – mais uma vez – da Fundação de Apoio à Pesquisa do Distrito Federal (FAPDF). À FAPDF o nosso reconhecimento e o nosso muito obrigado. Estamos também muito gratos a todos os participantes por construírem conosco mais uma edição do SeedMol. A todos vocês e às instituições envolvidas, nossa gratidão.

Desejamos a todos um excelente evento.

A Comissão Organizadora

Comissão Organizadora

João B. L. Martins (UnB, Chair) <http://lattes.cnpq.br/9324906986142829>

José R. dos S. Politi (UnB)

Ricardo Gargano (UnB)

Geraldo Magela (UnB)

Heibbe C. B. de Oliveira(UnB)

Elton A. S. de Castro (UEG)

Demétrio A. S. Filho (UnB)

L. Roncaratti (UnB)

Alessandra Ferreira Albernaz (UnB)

Luciano Ribeiro (UEG)

Valter Henrique Carvalho Silva (UEG)

Marcos Antônio de Castro (UFG)

Comissão Científica

Alessandra Ferreira Albernaz (UnB)

José R. dos S. Politi (UnB)

Elton A. S. de Castro (UEG)

Demétrio A. S. Filho (UnB)

L. Roncaratti (UnB)

Herbert de Castro Georg (UFG)

Davi Alessandro Cardoso Ferreira (UnB)



- 1. Recepção
- 4. Centro de Eventos
- 7. Área das piscinas
- 10. Chalés do Sol

- 2. Apartamentos Vila Vitória
- 5. Restaurante
- 8. Recanto do pescador
- 11. Apartamentos Pássaros

- 3. Chalés da Lua
- 6. Piscina de água mineral
- 9. Baías e curral



Programação

	Seg. 17/09	Ter. 18/09	Qua. 19/09	Qui. 20/09	Sex. 21/09
8:00 – 10:00	Ônibus Aeroporto e UnB para Vila Velluti Hotel Saída 14:30	Minicursos 1, 2, 3	Minicursos 1, 2, 3	Minicursos 4, 5, 6, 7	Minicursos 4, 5, 6, 7
10:00 – 10:20		<i>Intervalo</i>	<i>Intervalo</i>	<i>Intervalo</i>	<i>Intervalo</i>
10:20 – 11:00		C1	C4	C7	C10
11:00 – 11:20		P1	P10	P19	P24
11:20 – 12:00		C2	C5	C8	Encerramento
12:10 – 14:00		Almoço*	Almoço*	Almoço*	Almoço*
14:00 – 14:20		P2	P11	P20	Saída 14:00
14:20 – 14:40		P3	P12	P21	
14:40 – 15:20		C3	C6	C9	
15:20 – 15:40		P4	P13	P22	
15:40 – 16:00		P5	P14	P23	
16:00 – 16:30			<i>Coffee-break</i>	<i>Coffee-break</i>	-
16:30 – 16:50	Entrega dos Materiais aos Inscritos 16:00 – 18:00	P6	P15		
16:50 – 17:10		P7	P16	-	
17:10 – 17:30		P8	P17	-	
17:30 – 17:50		P9	P17	-	
18:00 – 18:20	Abertura	Pôster	Pôster	-	
18:20 – 19:00	Palestra de Abertura				
19:30 – 21:30	Jantar de Confraternização*	Jantar*	Jantar*	Jantar*	

*Para participantes hospedados no hotel.

Segunda-feira, 17 de setembro de 2018

14h30 – 16h00	<i>Transfer</i> Aeroporto e UnB para o Vila Velluti Hotel
16h00 – 18h00	Credenciamento
18h00 – 18h20	Abertura
18h20 – 19h00	Palestra de Abertura Prof. Dr. Paulo Augusto Netz, UFRGS Título: Novos métodos de simulação em ácidos nucleicos
19h30 – 21h30	Jantar de Confraternização ^{&}

[&] Para os participantes hospedados no hotel.

Terça-feira, 18 de setembro de 2018

08:00 – 10:00	Minicursos
	Minicurso 1 Prof. Sérgio Galembeck (FFCLRP, USP) Ligação química: aspectos contemporâneos.
	Minicurso 2 Prof. Alejandro Lopez Castillo (UFSCar) Algumas Questões Simples e Fundamentais em Sistemas Atômicos e Moleculares.
	Minicurso 3 Dr. Tiago Espinosa de Oliveira (ICS-CNRS) Hands-on building blocks – uma metodologia aplicada à dinâmica molecular de sistemas poliméricos.
10:00 – 10:20	Intervalo
10:20 – 11:00	Conferência
	C1 Prof. Alexander Brown (University of Alberta, Canadá) Título: <i>Two-photon absorption for biological imaging: Insights from computation.</i>
11:00 – 11:20	Apresentação Oral

<p>P1 ID 17354 <i>Cálculo teórico de propriedades estruturais e energéticas de grafeno e óxido de grafeno.</i> Beatriz Costa Guedes* (IC), José R. S. Politi (PG)</p>
<p>11:20 – 12:00 Conferência C2 Prof. Benedito José Costa Cabral (Universidade de Lisboa, Portugal) Título: <i>Dinâmica molecular ab initio e propriedades eletrônicas de sistemas complexos.</i></p>
<p>12:10 – 14:00 Almoço^{&}</p>
<p>14:00 – 14:20 Apresentação Oral</p> <p>P2- ID 17356 <i>Gas-Sensing Properties of Noble Metal Decorated Carbon Nanotubes.</i> Kleuton Antunes Lopes Lima* (PG), Bernhard Georg Enders Neto (PQ), Luiz Antônio Ribeiro Júnior (PQ)</p>
<p>14:20 – 14:40 Apresentação Oral</p>
<p>P3- ID 17361 <i>BOPP software: parallelization strategies for a good load balancing.</i> Carlos Vital Dos Santos Jr* (IC), Albano N. C. Neto (PG), Renaldo T. Moura Jr (PQ).</p>
<p>14:40 – 15:20 Conferência C3 Dr. Peng Tao (SMU, USA) Título: <i>Developing novel computational methods to explore protein allosteric mechanisms through Markov state models and machine learning methods.</i></p>
<p>15:20 – 15:40 Apresentação Oral</p>
<p>P4- ID 17561 <i>Lewis acid-base adducts studied by the chemical bond overlap model.</i> Ewerton Matias de Lima* (IC), Renaldo T. Moura Jr (PQ).</p>
<p>15:40 – 16:00 Apresentação Oral</p>
<p>P5- ID 17421 <i>Development of classical models for the description of QM properties in photoinduced processes: the case of peridinin.</i> Ingrid Guarnetti Prandi* (PG), Benedetta Mennucci (PQ)</p>
<p>16:00 – 16:30 Coffee-break</p>

16:30 – 16:50 Apresentação Oral		
P6- ID 17457 <i>Study of the effects of aqueous solvation on the structure of glucosamine using the Car-Parrinello molecular dynamics.</i> Lilian Tatiane Ferreira de Melo Camargo* (PG), Roberta Siginine (PQ), Allane Catharina (PQ), Ademir João Camargo (PQ)		
16:50 – 17:10 Apresentação Oral		
P7- ID 17373 <i>Electron Scattering by HOOCI Molecules.</i> Mylene Hartz Ribas* (PG), Milton M. Fujimoto (PQ)		
17:10 – 17:30 Apresentação Oral		
P8- ID 17500 <i>Ionic liquid simulations: Classical force field fails in structure description of [C4C1Im][BF4].</i> Kalil Bernardino* (PQ), Vitor H. Paschoal (PG), Mauro C. C. Ribeiro (PQ)		
17:30 – 17:50 Apresentação Oral		
P9- ID 17518 <i>Comparison Between Configurational Bias Monte Carlo and Molecular Dynamics Sampling for Sampling Conformational Stability with High Energy Barriers.</i> Henrique Musseli Cezar* (PG), Sylvio Canuto (PQ), Kaline Coutinho (PQ)		
18:00 – 19:00 Sessão de Pôster		
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	FT studies of gas hydrate formation	Daniel Garcez Quattrociochi Santos
17449	Distribuição Angular das Seções de Choque da Reação $H + Li_2$: um Estudo Convergente 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 TiO ₂ : 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 Carpparinello Molecular Dynamics	Allane Catharina C. 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 MoSe ₂ /Graphene Van der Waals Heterostructures: an ab-initio Study.	Weverson Lucas Aguiar de Paula Silva
19:30 – 21:30 Jantar^{&}		

[&]Para os participantes hospedados no hotel.

Quarta-feira, 19 de setembro de 2018

08:00 – 10:00 Minicursos

Minicurso 1

Prof. Sérgio Galembeck (FFCLRP, USP)

Ligação química: aspectos contemporâneos.

Minicurso 2

Prof. Alejandro Lopez Castillo (UFSCar)

Algumas Questões Simples e Fundamentais em Sistemas Atômicos e Moleculares.

<p>Minicurso 3 Dr. Tiago Espinosa de Oliveira (ICS-CNRS) Hands-on building blocks – uma metodologia aplicada à dinâmica molecular de sistemas poliméricos.</p>
<p>10:00 – 10:20 Intervalo</p>
<p>10:20 – 11:00 Conferência C4 Prof. Francesc Illas (Universitat de Barcelona, Espanha) Título: <i>Accurate simulation and prediction of properties of realistic oxide nanoparticles of interest in photocatalysis.</i></p>
<p>11:00 – 11:20 Apresentação Oral</p> <p>P10-ID 17520 <i>Estudo computacional da interação entre o elemento de terra rara lantânio e os extratantes DEHPA e P507.</i> Julio Cesar Guedes Correia* (PQ), Thayane P. Wandermurem (IC), Fernanda B. da Silva (PQ), Maurício T. M. Cruz (PQ), Letícia M. Prates (PG), Júlio C. G Correia (PQ), Ysrael M. Vera (PQ).</p>
<p>11:20 – 12:00 Conferência C5 Adam Pecina, Ph.D. (IOCB, Prague, República Checa) Título: <i>Semiempirical-based Scoring Function: Fast and Accurate Binding Affinity Prediction Tool.</i></p>
<p>12:10 – 14:00 Almoço^{&}</p>
<p>14:00 – 14:20 Apresentação Oral</p> <p>P11- ID 17531 <i>The interaction between Rg and the chiral molecule propylene oxide.</i> Patricia R P Barreto* (PQ), Ana Claudia PS Cruz (PG), Henrique O. Euclides (PG), Alessandra F. Albernaz (PQ), Federico Palazzetti (PQ), Fernando Pirani (PQ)</p>
<p>14:20 – 14:40 Apresentação Oral</p> <p>P12- ID 17549 <i>Influência da dopagem com Fe nas propriedades estruturais e eletrônicas do TiO₂ anatase e rutilo.</i> Renato Garcia de Freitas Sobrinho* (PQ), Ericson H. N. S. Thaines (PG), Juliana K. C. Salgado (PG), Ailton J. Terezo (PQ), Paulo R. G. Gonçalves (PG), Gabriel L.C. Souza (PQ), Hélio A. Duarte (PQ)</p>

<p>14:40 – 15:20 Conferência C6 Prof. Piotr de Silva (DTU, Dinamarca) Título: <i>DFT modeling of organic materials for energy storage applications.</i></p>
<p>15:20 – 15:40 Apresentação Oral</p> <p>P13- ID 17544 <i>The intrinsic strength of non-covalent interactions described by coupled cluster theory.</i> Vytor Pinheiro Oliveira* (PQ), Elfi Kraka (PQ)</p>
<p>15:40 – 16:00 Apresentação Oral</p> <p>P14- ID 17545 <i>Modelagem de Novos Inibidores das Metaloproteinases da Matriz (MMPs) Baseados em Ligantes ZBGs Derivados das Tetraciclinas.</i> Bruna Luana Marcial* (PQ), Lidiane Wiesner (IC), Leonardo A. Souza (PQ)</p>
<p>16:00 – 16:30 Coffee-break</p>
<p>16:30 – 16:50 Apresentação Oral</p> <p>P15- ID 17550 <i>Espectroscopia em UV-VIS do pireno isolado e em água.</i> Eric Lobato Graef Eric Lobato Graef* (IC), João Batista Lopes Martins (PQ)</p>
<p>16:50 – 17:10 Apresentação Oral</p> <p>P16- ID 17552 <i>A 13C chemical shift station factor for polyphenols with replaced chalcones.</i> Thais Forest Giacomello Thaís Forest Giacomello*(PG), Gunar Vingre da Silva Mota (PQ), Fabio Luiz Paranhos Costa (PQ)</p>
<p>17:10 – 17:30 Apresentação Oral</p> <p>P17- ID 17555 <i>Propriedades Termodinâmicas da Interação de Solventes Orgânicos com Fullerenos.</i> Laryssa Missias de Faria* (PG), Luciano Ribeiro (PQ)</p>
<p>17:30 – 17:50 Apresentação Oral</p> <p>P18- ID 17557</p>

<i>Revealing the retrodonation effect by the chemical bond overlap model in organometallic systems.</i>		
Carlos Vital Dos Santos Júnior* (IC), Albano N. Carneiro Neto (PG), Renaldo T. Moura Jr (PQ)		
18:00 – 19:00 Sessão de Pôster		
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 H ₂ pairs	Thais Forest Giacomello
17554	Superfícies de Hirshfeld na interpretação das interações moleculares do Produto Natural C16 H ₂₀ O ₅	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 ³¹ P NMR chemical shifts in phosphorus compounds: correlations between theory and experiment	Mayrla Letícia Alves de Oliveira
17560	NMR ¹³ C 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	Mariana Aparecida

	shifts using scale factors	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 benzimidazóis 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	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 $H_2CO \rightarrow H_2 + CO$ via TST	Henrique de Oliveira Euclides
17602	Quantum Chemistry Calculations for interaction between H_2O-HX and H_2O-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 S. Santos
17649	Dipole Moment of Urea Molecule on Gas Phase	Antonio Luiz de

	and Solvent	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
19:30 – 21:30 Jantar^{&}		

[&]Para os participantes hospedados no hotel.

Quinta-feira, 20 de setembro de 2018

08:00 – 10:00 Minicursos

Minicurso 4

Prof. Paulo Augusto Netz (UFRGS)

Termodinâmica do não equilíbrio: diferentes abordagens

Minicurso 5

Prof. Renato Garcia Freitas Sobrinho (UFMT)

QuantumESPRESSO

Minicurso 6

Prof. Davi Alessandro Cardoso Ferreira (UnB)

Cálculos *ab initio* aplicados à astroquímica

Minicurso 7

Prof. Ricardo Luiz Longo (UFPE)

Dinâmica de reações, mecanismos e seletividade

10:00 – 10:20 Intervalo

10:20 – 11:00 Conferência

C7

Dr. Gjergji Sini (Université de Cergy-Pontoise, França)

Título: *On the molecular origin of charge separation in organic solar cells:*

<i>theoretical and experimental insights</i>
11:00 – 11:20 Apresentação Oral
P19-ID 17559 <i>Unrevealing the semiconductors properties</i> Amanda Fernandes Gouveia*(PG), Laécio S. Cavalcante (PQ), Juan Andrés (PQ), Elson Longo (PQ)
11:20 – 12:00 Conferência C8 Prof. Paula Homem de Mello (UFABC) Título: <i>Modelos híbridos para terapia fotodinâmica, sensores e células solares</i>
12:10 – 14:00 Almoço^{&}
14:00 – 14:20 Apresentação Oral
P20- ID 17568 <i>Ab-initio</i> Calculations of Diffusion Lengths and Diffusivities for Singlet Excitons in Organic Materials. Fernando Teixeira Bueno Fernando Teixeira Bueno* (IC), Leonardo Evaristo Sousa (PG), Demétrio Antônio da Silva Filho (PQ), Pedro Henrique de Oliveira Neto (PQ)
14:20 – 14:40 Apresentação Oral
P21- ID 17575 <i>Efeito de desordem energética na dinâmica de éxcitons em cristais de tetraceno.</i> Marina Pinheiro Dourado*(PG), Demétrio Antônio da Silva Filho(PQ), Leonardo Evaristo de Sousa (PG), Pedro Henrique de Oliveira Neto (PQ).
14:40 – 15:20 Conferência C9 Prof. Gabriel Luiz Cruz de Souza (UFMT) Título: <i>Antioxidant activity of myricetin-like compound</i>
15:20 – 15:40 Apresentação Oral
P22- ID 17577 <i>Estudo de estrutura eletrônica da interação de inibidores da proteína Tirosina Quinase Abl-Bcr na forma mutada frente a forma selvagem.</i> Washington Almeida Pereira*(PG), Érica C. M. Nascimento (PQ), João B. L. Martins(PQ)
15:40 – 16:00 Apresentação Oral
P23- ID 17578

Theoretical Study of Doped Fullerene for Transport and Detection of Carbamazepine.

Rodrigo Aparecido Lemos Silva* (PG), Daniel F. S. Machado (PQ), Luciano Ribeiro (PQ), Heibbe C. B. de Oliveira (PQ) Demétrio A. da Silva Filho (PQ)

19:30 – 21:30 Jantar[&]

[&]Para os participantes hospedados no hotel.

Sexta-feira, 21 de setembro de 2018

08:00 – 10:00 Minicursos

Minicurso 4

Prof. Paulo Augusto Netz (UFRGS)

Termodinâmica do não equilíbrio: diferentes abordagens.

Minicurso 5

Prof. Renato Garcia Freitas Sobrinho (UFMT)

QuantumESPRESSO

Minicurso 6

Prof. Davi Alexandro Cardoso Ferreira (UnB)

Cálculos *ab initio* aplicados à astroquímica

Minicurso 7

Prof. Ricardo Luiz Longo (UFPE)

Dinâmica de reações, mecanismos e seletividade

10:00 – 10:20 Intervalo

10:20 – 11:00 Conferência

C10

Dra. Érica Cristina Moreno Nascimento (UJI, Espanha)

Título: *Acetylcholinesterase Inhibitors through Molecular Docking Simulations: A critical Overview.*

11:00 – 11:20 Apresentação Oral

P24-ID 17606

<i>Theoretical Kinetic Studies of the Hydrodehalogenation Reaction of CBrClF₂ (Halon-1211).</i>	
Alessandra Ferreira Albernaz*(PQ), Patrícia R. P. Barreto (PQ)	
11:20 – 12:00	Encerramento
12:10 – 14:00	Almoço^{&}
14:00 – 14:20	Saída 14:00

[&]Para os participantes hospedados no hotel.

VII Simpósio de Estrutura Eletrônica e Dinâmica Molecular

17 – 21 de setembro de 2018

Realização:



UnB



UEG



UFG

Apoio :



Secretaria:

