

XXI Simpósio Brasileiro de Química Teórica (SBQT)

Programação Científica

| Segunda (08/11) | |
|-----------------|--|
| 10:00-10:30 | Sessão de Abertura Coordenador: Willian R. Rocha |
| 10:30-11:30 | Palestra Plenária 1 Sylvio Canuto Universidade de São Paulo - USP <i>"Theoretical Studies of Molecular Spectroscopy in Simple Liquids and Complex Environments"</i> |
| 11:30-14:00 | Almoço |
| | Coordenador: José Walkimar de Mesquita Carneiro - UFF |
| 14:00-14:40 | Palestra 1 Josefredo R. Pliego Jr. Universidade Federal de São João del-Rei - UFSJ <i>"Beyond the Solvent Effect: Theoretical Design of Nanostructured Environment for Controlling Ionic Reactions"</i> |
| 14:40-15:20 | Palestra 2 Elizete Ventura do Monte Universidade Federal da Paraíba - UFPB <i>"Photophysical study of solute-solvent energy transfer"</i> |
| 15:20-16:00 | Palestra 3 Ricardo Oliveira Freire Universidade Federal de Sergipe - UFS <i>"Development and application of methods and software for the study of luminescent nanomaterials for application as chemical sensors and markers"</i> |
| 16:00-16:30 | Intervalo |
| | Coordenador: João Paulo Ataíde Martins - UFMG |
| 16:30-16:45 | Apresentação Oral 1 Tiago Vinícius Alves Universidade Federal da Bahia - UFBA <i>"Differences in the torsional anharmonicity between reactant and transition state: the case of 3-butenal + H abstraction reactions"</i> |
| 16:45-17:00 | Apresentação Oral 2 Alex Bispo Gama Universidade Estadual de Goiás - UEG <i>"Interpretação da Cinética Super-Arrhenius em Processos Biológicos: Incorporação da Relação de Kramers-Stokes-Einstein"</i> |
| 17:00-17:15 | Apresentação Oral 3 Carlos Vital dos Santos Júnior Universidade Federal do Rio Grande do Norte - UFRN <i>"Analysis of chemical bonds in $S_N2@C$ and $@Si$ reactions mechanisms in the gas phase"</i> |

| | |
|--------------------|---|
| 17:15-17:30 | Sessão de Perguntas e Respostas das Apresentações Orais |
| 17:30-18:30 | Sessão de Pôster 1 |

| Terça (09/11) | |
|----------------------|--|
| | Coordenador: André Farias de Moura - UFSCAR |
| 9:00-9:40 | Palestra 4 Alejandro Toro-Labbé Pontificia Universidad Católica de Chile - Chile <i>“Unveiling the Mystery of Reaction Mechanisms”</i> |
| 09:40-10:30 | Palestra Plenária 2 Maria João Ramos Universidade do Porto - Portugal <i>“Biodegrading Plastic”</i> |
| 10:30-11:10 | Palestra 5 Bruno Araújo C. Horta Universidade Federal do Rio de Janeiro - UFRJ <i>“Software Tools for Force-Field Development”</i> |
| 11:10-12:00 | Palestra Plenária 3 Matthias Bickelhaupt Vrije Universiteit Amsterdam - Netherlands <i>“Paradigm Shifts in the Theory of Chemical Structure and Reactivity”</i> |
| 12:00-14:00 | Almoço |
| 14:00-16:00 | Especial Session 40 years of SBQT Coordenador: Marco Antônio Chaer do Nascimento Universidade Federal do Rio de Janeiro - UFRJ |
| 16:00-16:30 | Intervalo |
| | Coordenador: Renaldo Tenório Moura Júnior - UFPB |
| 16:30-16:45 | Apresentação Oral 4 Leonardo Baptista Universidade do Estado do Rio de Janeiro - UERJ <i>“Estudo da Decomposição Térmica do Sistema H₂O₂/H₂O e Suas Aplicações na Indústria Aeroespacial”</i> |
| 16:45-17:00 | Apresentação Oral 5 Paulo Henrique Ribeiro Amaral Universidade de São Paulo - USP <i>“Positron binding to atoms and molecules: Machine learning studies”</i> |
| 17:00-17:15 | Apresentação Oral 6 Tiago Espinosa de Oliveira Universidade Federal de Ciências da Saúde de Porto Alegre - UFCSPA <i>“Estudos computacionais da poli(N-isopropilacrilamida) em solução aquosa de glicerol”</i> |
| 17:15-17:30 | Sessão de Perguntas e Respostas das Apresentações Orais |
| 17:30-18:30 | Sessão de Pôster 2 |

| Quarta (10/11) | |
|-----------------------|---|
| | Coordenador: Itamar Borges Junior - IME |
| 9:00-9:40 | Palestra 6 Annika Bande Helmholtz-Zentrum Berlin - Germany <i>"The Fascinating Journeys of Electrons in the Realm of Nanostructures"</i> |
| 09:40-10:30 | Palestra Plenária 4 Feliu Maseras Institut Català d'Investigació Química - Spain <i>"How does microkinetic modeling bring DFT closer to experiment ?"</i> |
| 10:30-11:10 | Palestra 7 Luis Guilherme C. Rego Universidade Federal de Santa Catarina - UFSC <i>"Spin-Dependent Transport in Chiral Molecular Wires"</i> |
| 11:10-12:00 | Palestra Plenária 5 Frank Neese Max-Planck Institut Für Kohlenforschung - Germany <i>"How Nature Activates the C-H Bond in Methane: Lessons from a Combination of Spectroscopy and Quantum Chemistry"</i> |
| 12:00-14:00 | Almoço |
| | Coordenador: Guilherme Ferreira de Lima - UFMG |
| 14:00-14:40 | Palestra 8 Antônio José Roque Centro Nacional de Pesquisa em Energia e Materiais <i>"O CNPEM e a nova Fonte de Luz Síncrotron Brasileira, Sirius"</i> |
| 14:40-15:20 | Palestra 9 Giovanni F. Caramori Universidade Federal de Santa Catarina - UFSC <i>"Automotive Quantum Chemical Microkinetic Simulations for Complex Chemical Reactions"</i> |
| 15:20-16:00 | Palestra 10 Ataulpa A. C. Braga Universidade de São Paulo - USP <i>"Novel Ni-catalyzed C-C and C-O coupling reactions: a computational approach"</i> |
| 16:00-16:30 | Intervalo |
| | Coordenador: Hubert Karl Stassen - UFRGS |
| 16:30-16:45 | Apresentação Oral 7 Gabriel Urquiza Universidade Federal de Pernambuco - UFPE <i>"An Uncomplicated but Effective Force Field for the Pre-optimization of Geometries of Metal Complexes for Quantum Chemical Calculations"</i> |
| 16:45-17:00 | Apresentação Oral 8 Yuro Alexandre Aoto Universidade Federal do ABC - UFABC |

| | |
|--------------------|--|
| | <i>"A geometric interpretation for coupled-cluster theory being more accurate than corresponding configuration interaction"</i> |
| 17:00-17:15 | Apresentação Oral 9 Kalil Bernardino Universidade de São Paulo - USP <i>"Role of coulomb interactions and density on the viscosity and non-newtonian behavior of ionic liquids - a molecular dynamics study"</i> |
| 17:15-17:30 | Sessão de Perguntas e Respostas das Apresentações Oraís |
| 17:30-18:30 | Sessão de Pôster 3 |

| Quinta (11/11) | |
|-----------------------|---|
| 9:00-9:20 | Alfredo Mayall Simas Universidade Federal de Pernambuco - UFPE Introdução à Sessão Especial: <i>Computação Quântica e Inteligência Artificial em Química Teórica</i> |
| 09:20-9:50 | Mesa Redonda: <i>Quantum Computing and Artificial Intelligence in Theoretical Chemistry</i> Coordenador: Alfredo Mayall Simas Debatedores: Alán Aspuru-Guzik - University of Toronto - Canada Pavlo Dral - Xiamen University - China Juarez L. F. da Silva - Universidade de São Paulo - USP |
| 09:50-10:40 | Palestra Plenária 6 Alán Aspuru-Guzik University of Toronto - Canada <i>"There is no time for science as usual"</i> |
| 10:40-11:30 | Palestra Plenária 7 Pavlo Dral Xiamen University - China <i>"Quantum Chemistry Assisted by Machine Learning"</i> |
| 11:30-12:10 | Palestra 11 Juarez L. F. da Silva Universidade de São Paulo - USP <i>"Challenges to Combine Quantum Chemistry, Machine Learning, and Data Mining Techniques to the Study and Design of Molecular Systems"</i> |
| 12:10-14:00 | Almoço |
| | Coordenador: Kelson Mota Teixeira de Oliveira - UFAM |
| 14:00-14:40 | Palestra 12 Sergey Varganov University of Nevada - USA <i>"Modeling Kinetics and Dynamics of Spin-Dependent Processes"</i> |
| 14:40-15:20 | Palestra 13 Jaroslav Burda Charles University - Czech Republic <i>"Electronic excited states of conjugated molecules and their lifetimes"</i> |

| | |
|--------------------|--|
| 15:20-16:00 | Palestra 14 Breno R. L. Galvão Centro Federal de Educação Tecnológica de Minas Gerais - CEFET-MG <i>“Chemistry in the Interstellar medium”</i> |
| 16:00-16:30 | Intervalo |
| | Coordenadora: Dalva Ester da Costa Ferreira - UFVJM |
| 16:30-16:45 | Apresentação Oral 10 Graziâni Candiotto Universidade Federal do Rio de Janeiro - UFRJ <i>“OLEDs de Alq3 dopado com DCM2: desvio para o vermelho causado pelo efeito stark não linear e pela difusão de excitons mediada por Förster”</i> |
| 16:45-17:00 | Apresentação Oral 11 Maicon Lourenço Universidade Federal do Espírito Santo - UFES <i>“Advances on Active Learning for Efficient Global Optimization of Atomic Clusters”</i> |
| 17:00-17:15 | Apresentação Oral 12 Leonardo Dos Santos Universidade Federal de Minas Gerais - UFMG <i>“Electron-Density Polarization Effects in Molecular Crystals and Bioactive Environments”</i> |
| 17:15-17:30 | Sessão de Perguntas e Respostas das Apresentações Orais |
| 17:30-18:30 | Sessão de Pôster 4 |

| Sexta (12/11) | |
|----------------------|---|
| | Coordenador: Demétrio Antônio da Silva Filho - UNB |
| 9:00-9:40 | Palestra 15 Glória Cárdenas-Jíron Universidade de Santiago de Chile - Chile <i>“Tuning the Visible/Near-Infrared Optical Properties and Charge Transport of Porphyrins and Phthalocyanines”</i> |
| 09:40-10:30 | Palestra Plenária 8 Márcia C. Barbosa Universidade Federal do Rio Grande do Sul - UFRGS <i>“Water: from the Ice Age to the Carbon Nanotubes”</i> |
| 10:30-11:10 | Palestra 16 Victor Batista Yale University - USA <i>“Studies of PCET in Natural and Artificial Photosynthesis”</i> |
| 11:10-11:50 | Palestra 17 José Rachid Mohallem Universidade Federal de Minas Gerais - UFMG <i>“Benchmark Spectroscopic Linelists of Primordial Molecules for Astrophysics and Astrochemistry”</i> |

| | |
|--------------------|--|
| 11:50-14:00 | Almoço |
| | Coordenador: Heitor Avelino de Abreu - UFMG |
| 14:00-14:40 | Palestra 18 Teodorico C. Ramalho Universidade Federal de Lavras - UFLA <i>"Innovation and opportunities toward new molecules for the agrochemical industry: from theory to technology"</i> |
| 14:40-15:20 | Palestra 19 Carolina Horta Andrade Universidade Federal de Goiás - UFG <i>"Artificial Intelligence-Assisted Drug Discovery for Neglected and Emerging Diseases"</i> |
| 15:20-16:00 | Apresentação Oral dos Patrocinadores: Seagate Versatus |
| 16:00-16:30 | Intervalo |
| 16:30-18:30 | Sessão de Encerramento |