

# XIII SBQT 2005

## XIII Simpósio Brasileiro de Química Teórica

20 a 23 de Novembro de 2005 em São Pedro, SP

### PROGRAMA FINAL

HORÁRIO	20/11 (DOM)	21/11 (2a.)	22/11 (3a.)	23/11 (4a.)
08:30- 09:30		Palestra 2	Palestra 6	Palestra de Encerramento
09:30- 10:00		Conferência 1	Conferência 6	Café
10:00- 10:30		Conferência 2	Conferência 7	Assembléia
10:30- 11:00		Café	Café	
11:00- 12:00		Palestra 3	Palestra 7	Encerramento e Premiação
12:00- 14:00		ALMOÇO	ALMOÇO	ALMOÇO
14:30- 15:00		Conferência 3	Conferência 8	Saída dos Ônibus
15:00- 15:30		Conferência 4	Conferência 9	
15:30- 16:30	Recepção, Registro e Fixação dos Pôsteres	Palestra 4	Palestra 8	
16:30- 17:00		Café	Café	
17:00- 17:30		Conferência 5	Conferência 10	
17:30- 18:30		Palestra 5	Palestra 9	
19:00- 20:30	JANTAR	JANTAR	JANTAR	
20:30- 21:00	Cerimônia de Abertura	Painéis PARES	Painéis ÍMPARES	
21:00- 22:00	Palestra de Abertura			
22:00- 24:00	Coquetel		Apresentação Musical	

## **PALESTRAS**

1. Prof. Sylvio Canuto (Universidade de São Paulo, São Paulo, SP)  
**Química Quântica e Modelagem Molecular em Perspectiva.**
2. Profa. Emily A. Carter (Princeton University, EUA)  
**Stressed-Out Materials: Learning From Failure From the Bottom Up.**
3. Prof. J. Vincent Ortiz (Kansas State University, EUA)  
**Predicting and Understanding Chemical Bonding with Electron Propagator Theory.**
4. Prof. António Varandas (Universidade de Coimbra, Portugal)  
**Accurate potentials and quantum dynamics of reactive molecules.**
5. Prof. David Ceperley (University of Illinois, EUA)  
**Coupled Electron-Ion Monte Carlo Simulations.**
6. Prof. Roberto Lins (Pacific Northwest National Laboratory, EUA)  
**Simulating the Sweet Side of Life: From Parameter Development to Bioremediation.**
7. Prof. Hans Lischka (Universidade de Viena, Austria)  
**Ab initio theory and on-the-fly dynamics: the photochemistry of the C=C bond and excited-state proton transfer.**
8. Prof. Richard Bader (McMaster University, Canada)  
**The Quantum Mechanical Basis Of Conceptual Chemistry.**
9. Prof. Rogério Custodio (UNICAMP, Campinas, SP)  
**Experimentos Computacionais com o Método Monte Carlo Quântico Aplicado em Estrutura Eletrônica.**
10. Prof. Alfredo Mayall Simas (UFPE, Recife, PE)  
**Novos Modelos Semi-Empíricos para o Cálculo de Biomoléculas, Nanoestruturas e Complexos de Lantanídeos.**

## **CONFERÊNCIAS**

1. Laurent Emmanuel Dardenne [dardenne@lncc.br](mailto:dardenne@lncc.br)  
**CROSS-DOCKING OF HIGHLY FLEXIBLE LIGANDS USING A MULTISOLUTION-GSA DOCKING METHOD**  
(Laboratório Nacional de Computação Científica, Petropolis, RJ)
2. Juliana Palma [juliana@unq.edu.ar](mailto:juliana@unq.edu.ar)  
**THE EFFECT OF PROTEIN VIBRATIONS ON THE RATE DETERMINANT STEP IN THE OXIDATION OF METHYLAMINE CATALYZED BY METHYLAMINE DEHYDROGENASE.**  
(Universidad Nacional de Quilmes, Argentina)
3. James E. Boggs [James.boggs@mail.utexas.edu](mailto:James.boggs@mail.utexas.edu)  
**THERMODYNAMICS OF RADICALS INVOLVED IN ATMOSPHERIC CHEMISTRY.**  
(The University of Texas, EUA)
4. Alexandre Braga da Rocha [rocha@iq.ufrj.br](mailto:rocha@iq.ufrj.br)  
**TRANSIÇÕES D-D EM COMPOSTOS DE METAIS DE TRANSIÇÃO: UMA ABORDAGEM QUANTITATIVA**  
(Universidade Federal do Rio de Janeiro, Rio de Janeiro, RJ)
5. Claudia F. Braga [claudiafb2003@yahoo.com.br](mailto:claudiafb2003@yahoo.com.br)  
**MODELAGEM DE REAÇÕES QUIRAIS EM ZEÓLITA Y**  
(Universidade Federal da Paraíba, João Pessoa, PB)
6. Paulo Fernando Bruno Gonçalves [paulo@iq.ufrgs.br](mailto:paulo@iq.ufrgs.br)  
**MOLECULAR DYNAMICS SIMULATION OF CALCIUM BINDING EFFECTS TO AN ANIONIC LIPID BILAYER**  
(Universidade Federal do Rio Grande do Sul, Porto Alegre, RS)
7. Gloria I. Cardenas-Jiron [gcardena@lauca.usach.cl](mailto:gcardena@lauca.usach.cl)  
**THEORETICAL CHARACTERIZATION OF PORPHYRINS INVOLVED IN BORON NEUTRON CAPTURE THERAPY AND PHOTODYNAMICAL THERAPY**  
(Universidad de Santiago de Chile, CHILE)
8. Cristiano de Siqueira Esteves [csesteves@unb.br](mailto:csesteves@unb.br)  
**OBTENÇÃO DE CURVAS DE ENERGIA POTENCIAL PARA SISTEMAS DIATÔMICOS USANDO AS Q-FUNÇÕES**  
(Universidade de Brasília, Brasília, DF)
9. Luiz Antônio Sodré Costa [lrcosta22@gmail.com](mailto:lrcosta22@gmail.com)  
**THE ONIOM HYBRID APPROACH APPLIED TO THE STUDY OF THE Pt-DNA ADDUCT INTERACTIONS**  
(Universidade Federal de Minas Gerais, MG)
10. Luciano Sindra Virtuoso [lsvirtuoso@yahoo.com.br](mailto:lsvirtuoso@yahoo.com.br)  
**MODELAGEM DE SISTEMAS AQUOSOS BIFÁSICOS POR REDES NEURAIS ARTIFICIAIS**  
(Centro Universitário de Caratinga, MG)