

PROGRAMAÇÃO XIV SBQT

| 18 de Novembro (Domingo) | |
|--------------------------|--|
| 15h30 às 18h | Recepção, Registro e Fixação dos Pôsteres - PARES |
| 19h30 às 20h | Cerimônia de Abertura Welcome Coffee |
| 20h às 21h | Conferência 1 Abertura Adalberto Fazzio (USP) Apresentação: Sylvio Canuto (USP) |
| 21h10 às 23h | Brunch Show com a Banda BLUESTHEVILLE (Lançamento do CD " <i>Da Vila para o Blues</i> ") |
| 19 de Novembro (Segunda) | |
| 09h às 10h | Conferência 2 Gustavo Scuzeria (Rice University) Hybrid functionals: the role of non-local Hartree-Fock exchange Apresentação: Marco Antonio Chaer Nascimento |

| | |
|---------------------|--|
| 10h às 10h30 | <p style="text-align: center;">Palestra 1</p> <p style="text-align: center;">Molecular Properties Calculation using the q-Integrals Method in the Harttree-Fock Approach</p> <p style="text-align: center;">Kleber Carlos Mundim (IQ-UnB)</p> <p style="text-align: center;">Apresentação: Rogério Custódio (Unicamp)</p> |
| 10h30 às 11h | COFFEE BREAK |
| 11h às 12h | <p style="text-align: center;">Conferência 3</p> <p style="text-align: center;">Oswaldo Alves (UNICAMP)</p> <p style="text-align: center;">Apresentação: Luiz Carlos Gomide (UFSCar)</p> |
| 12h às 14h | ALMOÇO |
| 14h30 às 15h | <p style="text-align: center;">Palestra 2</p> <p style="text-align: center;">Simulação Dinâmica Molecular da Interconversão entre as Conformações A e B do DNA</p> <p style="text-align: center;">Paulo Augusto Netz (UFRGS)</p> <p style="text-align: center;">Apresentação: Rogério Custódio (Unicamp)</p> |

| | |
|----------------------------|--|
| <p>15h às 15h30</p> | <p style="text-align: center;">Palestra 3</p> <p>Otimização de Potenciais Efetivos para Descrição de Interações Fracas na Teoria do Funcional Densidade</p> <p style="text-align: center;">Maurício Domingues Coutinho Neto (Universidade Federal do ABC)</p> <p style="text-align: center;">Apresentação: Rogério Custódio (Unicamp)</p> |
| <p>15h30 às 16h</p> | <p style="text-align: center;">Conferência 4</p> <p style="text-align: center;">Clarissa Oliveira da Silva (UFRJ)</p> <p style="text-align: center;">Estudo das conformações de dissacarídeos em solução aquosa</p> <p style="text-align: center;">Apresentação: Alexandre Rocha (UFRJ)</p> |
| <p>16h às 16h30</p> | <p style="text-align: center;">COFFEE BREAK</p> |
| <p>16h30 às 17h</p> | <p style="text-align: center;">Palestra 4</p> <p style="text-align: center;">Facts and Artifacts in Te...pi-aryl interactions</p> <p style="text-align: center;">Julio Zukerman Schpector (UFSCar)</p> <p style="text-align: center;">Apresentação: Rogério Custódio (Unicamp)</p> |

| | |
|-------------------------------|--|
| 17h às 17h30 | <p style="text-align: center;">Palestra 5</p> <p style="text-align: center;">Multidimensional Quantum Dynamics in Polyatomic Molecules</p> <p style="text-align: center;">Roberto Marquardt (Université Louis Pasteur)</p> <p style="text-align: center;">Apresentação: Rogério Custódio (Unicamp)</p> |
| 19h às 19h30 | <p style="text-align: center;">JANTAR</p> |
| 19h30 às 23h | <p style="text-align: center;">Painéis PARES</p> <p style="text-align: center;">Coquetel de Lançamento do Livro "Métodos de Química Teórica e Modelagem Molecular"</p> <p style="text-align: center;">(Retirada dos posteres pares e fixação dos posteres ímpares)</p> |
| 20 de Novembro (Terça) | |
| 09h às 10h | <p style="text-align: center;">Conferência 5</p> <p style="text-align: center;">Mark Maroncelli (PenState University)</p> <p style="text-align: center;">Solvation and Spectroscopy in CO₂ – Expanded Liquids</p> <p style="text-align: center;">Apresentação: Munir Salomão Skaf (Unicamp)</p> |
| 10h às 10h30 | <p style="text-align: center;">Palestra 6</p> <p style="text-align: center;">A ligação química de 3-centro-2-elétrons em íons carbônio</p> <p style="text-align: center;">André Gustavo Horta Barbosa (Instituto de Química - UFF)</p> |

| | |
|--------------|--|
| | <p>Apresentação: Antonio Carlos Borin (USP)</p> |
| 10h30 às 11h | <p>COFFEE BREAK</p> |
| 11h às 12h | <p>Conferência 6</p> <p>Antônio Carlos Pavão (UFPe)</p> <p>Química Quântica e Popular Apresentação: Carlos Eduardo Bielschowsky (UFRJ)</p> |
| 12h às 14h | <p>ALMOÇO (Retirada dos pôsteres pares e fixação dos pôsteres ímpares)</p> |
| 14h30 às 15h | <p>Palestra 7</p> <p>Estudo MCSCF de alguns estados singlete do 2H-Tereazol</p> <p>Silmar Andrade do Monte (UFPB)</p> <p>Apresentação: Antonio Carlos Borin (USP)</p> |
| 15h às 15h30 | <p>Palestra 8</p> <p>Cross section calculations for elastic electron scattering from amino acids</p> <p>Ione Iga (UFSCar)</p> |

| | |
|----------------|--|
| | <p>Apresentação: Antonio Carlos Borin (USP)</p> |
| 15h30 às 16h | <p>Palestra 9</p> <p>Termodinâmica da Reação de Oxidação de Dimetilsulfóxido em Fase-Líquida</p> <p>Edilson Clemente da Silva (UFRJ)</p> <p>Apresentação: Antonio Carlos Borin (USP)</p> |
| 16h às 16h30 | <p>COFFEE BREAK</p> |
| 16h30 às 17h30 | <p>Conferência 7</p> <p>N. Yngve Öhrn (Quantum Theory Project, University of Florida)</p> <p>Time-Dependent, Nonadiabatic, Direct, Atomic and Molecular Reaction Dynamics</p> <p>Apresentação: Ricardo Longo (UFPe)</p> |
| 17h30 às 18h | <p>Palestra 10</p> <p>Acoplamento Magnético em Metal Organic Frameworks (MOFs) Baseadas em Unidades de Dicobre (II) Bezenotricarboxilatos (BTC)</p> <p>Ricardo Longo (UFPe)</p> |

| | |
|--------------------------------|--|
| | Apresentação: Apresentação: Antonio Carlos Borin (USP) |
| 19h às 19h30 | JANTAR |
| 19h30 às 23h | Painéis ÍMPARES |
| 21 de Novembro (Quarta) | |
| 09h às 10h | <p>Conferência 8</p> <p>Philippe H. Hunenberger (ETH Zürich)</p> <p>Determination of absolute single-ion solvation free energies: an experimental and theoretical mindbreaker</p> <p>Apresentação: Léo Dégreve (USP)</p> |
| 10h às 10h30 | <p>Palestra 11</p> <p>Aluminosilicate Nanotubes: Imogolite</p> <p>Hélio Anderson Duarte (UFMG)</p> |
| 10h30 às 11h | <p>Palestra 12</p> <p>How do Proteins take up the heat?</p> <p>Munir S. Skaf</p> |

| | |
|---------------------|--|
| | (Instituto de Química - Universidade Estadual de Campinas) |
| 11h às 12h30 | Assembléia, premiação e encerramento |
| 12h30 às 14h | ALMOÇO |
| 14h às 15h | SAÍDA DOS ÔNIBUS |