

SEMINÁRIO DIA 26/08/2022

Sala do GoogleMeet - 10 horas

“Química computacional no estudo dos metais de transição”.

Prof. Dr. Diego Fernando da Silva Paschoal (UFRJ)



Enfoque:

Existe um grande interesse na Química de metais de transição devido à sua ampla gama de aplicações, como no desenvolvimento de candidatos a materiais fotônicos e fármacos antitumorais. A Química Computacional pode contribuir no estudo da estrutura, reatividade e propriedades como as eletrônicas, ópticas não lineares e espectroscópicas de compostos com tais elementos. No entanto, estudos computacionais envolvendo metais de transição são custosos e de difícil resolução. Assim, faz-se necessário o desenvolvimento de metodologias adequadas, empregando métodos de Química Quântica e Química Quântica Relativística. Deste modo, na presente palestra serão discutidos o desenvolvimento e aplicação de protocolos computacionais para o estudo de diferentes propriedades envolvendo compostos de metais de transição.