

Química Computacional: Um Guia Prático para Métodos e Aplicações

Daniel Felipe Pietezak

Resumo: A química computacional é um campo que une princípios fundamentais da química e física com poder computacional para explorar a estrutura e as propriedades das moléculas em nível atômico. Esses métodos permitem calcular propriedades eletrônicas de alta precisão, sendo fundamentais para prever ou explicar comportamentos químicos que muitas vezes são inacessíveis experimentalmente. Esse seminário abordará conceitos históricos, teóricos até a aplicação em diferentes estudos de casos para resolução de problemas atuais da química com o uso de Teoria de Funcional Densidade com o *software* Orca.

Abstract: Computational chemistry is a field that combines fundamental principles of chemistry and physics with computational power to explore the structure and properties of molecules at the atomic level. These methods allow for the calculation of high-precision electronic properties, making them fundamental for predicting or explaining chemical behaviors that are often experimentally inaccessible. This seminar will cover historical and theoretical concepts, through to their application in various case studies for solving current chemical problems using Density Functional Theory (DFT) with the Orca software.

Sobre o palestrante: Licenciado em Química (UDESC) e Engenheiro Químico (UniSociesc) com mestrado na área de Ciência e Engenharia de Materiais (UDESC). Doutorando bolsista na área de Química Computacional (UFPel) e Assistente de TI no grupo de Laboratório de Inovação na Neogrid.