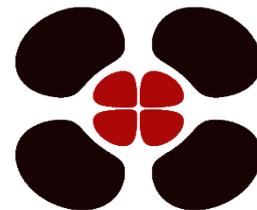




ESTRUTURA DA MATÉRIA E FÍSICA COMPUTACIONAL



Seminário de Grupo

Recursos Computacionais na Análise Vibracional de Grupos Moleculares

Kalil Nunes Oliveira

Departamento de Física - UNIR

Resumo: Os cálculos *ab initio* são inseridos num estudo quando se deseja obter respostas efetivas, baseadas no conjunto teórico já existente. O método é apropriado em análises de sistemas moleculares com muitos elétrons, o que seria impraticável de forma analítica devido ao grande número de elementos interagentes. Sob esse contexto, o método DFT (Density Functional Theory) é empregado na análise conformacional de grupos moleculares de interesse. A análise vibracional é uma etapa importante para identificar qual o padrão de menor energia produzido pelo cálculo computacional, sob parâmetros pré-estabelecidos.

28 de março de 2025, sexta-feira, 14 h

Auditório da Biblioteca, Campus Ji-Paraná - UNIR

<https://emfc.unir.br/>