

Simpósio de Estrutura Eletrônica e Dinâmica Molecular

João B. L. Martins

A 4ª edição do Simpósio de Estrutura Eletrônica e Dinâmica Molecular (IV SeedMol, www.seedmol.unb.br) ocorreu na Pousada dos Pireneus Resort, de 24 a 28 de setembro, Pirenópolis, GO. Esta formidável e histórica cidade está cerca de 170km de Brasília. O IV SeedMol teve vários pesquisadores nacionais e internacionais, dentre os quais 15 conferencistas do Brasil, EUA, Itália, Espanha, Chile, Venezuela e Colômbia. O objetivo foi prover um simpósio com cientistas de ponta trabalhando com a modelagem de diferentes sistemas, em catálise, bioinformática, modelagem de drogas, biocombustíveis, entre outros. As áreas alvo foram química teórica e computacional e física atômica e molecular.

Palavras-chave: *química medicinal, nanomateriais, modelagem molecular, simulação e bioinformática.*

The 4th edition of Electronic Structure and Molecular Dynamics Symposium (IV SeedMol, www.seedmol.unb.br) took place at the Pousada dos Pireneus Resort, from September 24 until the 28, Pirenópolis, GO. This amazing and historical city is about 170km from Brasilia. IV SeedMol had various national and international researchers, among them there were 15 speakers from Brazil, USA, Italy, Spain, Chile, Venezuela and Colombia. The aim is to provide a symposium with leading scientists working with modeling of different systems, in catalysis, bioinformatics, modeling of drugs, biofuels, and others. The target areas was computational and theoretical chemistry and atomic and molecular physics.

Keywords: *medicinal chemistry, nanomaterials, molecular modeling, simulation and bioinformatics.*

Introdução

Esta é a 4ª Edição do SeedMol (Simpósio de Estrutura Eletrônica e Dinâmica Molecular), é a primeira das edições fora da Universidade de Brasília. Neste contexto, é importante visualizar a trajetória do simpósio.

A primeira edição do SeedMol teve uma expressiva atuação dos Institutos de Física, Química e Biologia da Universidade de Brasília, além da Universidade Católica de Brasília, Universidade Federal de Goiás e Universidade Estadual de Goiás. Além dos pesquisadores do Centro-Oeste, também estavam presentes pesquisadores de outras instituições: USP, INPE e Unesp. O formato do I SeedMol foi caracterizado por um total de 19 palestras de alunos de graduação e pós-graduação e 19 palestras de docentes, pesquisadores e pós-doutorandos. Tivemos a participação total de 76 inscritos, o evento ocorreu de 13-15 de fevereiro de 2006 na Universidade de Brasília. Nesta edição o Prof. Hans Lischka apresentou um mini-curso sobre o programa Columbus.

O objetivo da segunda edição foi reunir a comunidade de pesquisadores da área científica, através da apresentação de palestras dos trabalhos desenvolvidos, promovendo uma oportunidade para discussões, divulgação de projetos. O II SeedMol contou com a presença de quatro pesquisadores estrangeiros, sendo eles: Dr. Oscar Ventura, Uruguay; Dr. Werner Treptow, University of Pennsylvania, USA; Prof. Dr. Fernando Ruetter, IVIC, Venezuela; Prof. Dr. Vincenzo Aquilanti e Prof. Dra. Simonetta Cavalli, Università degli Studi di Perugia, Itália e também de nomes chaves da pesquisa brasileira. No II SeedMol tivemos em média a participação de 90 inscritos. Foi acrescentado um módulo de mini-cursos e estendido o número de dias do simpósio de três para cinco, sendo de 25-29 de fevereiro de 2008. Isto possibilitou manter a estrutura de palestras, aliada as conferências, com a adição dos mini-cursos. Estava então caracterizado como um evento bianual.

A partir do III SeedMol o evento não aconteceu mais no primeiro semestre do ano. O III SeedMol, também realizado na Universidade de Brasília, foi de 13-17/10/2008, contou com a presença de diversos pesquisadores internacionais: Itália, Venezuela, Colômbia, Chile, Argentina, Espanha, dentre outros. Foram 15 palestrantes de alto nível, com duas mesas-

redondas que contribuíram para a discussão de temas relevantes da pesquisa e formação de recursos humanos. A integração da mesa-redonda foi uma ótima iniciativa propiciando discutir dois temas relevantes para a química teórica, novas alternativas ao método Hartree-Fock, enquanto que a segunda mesa-redonda discutia softwares livres. Na III Edição houve o apoio à eventos da CAPES, PAEP, que foi fundamental para a consecução dos objetivos, junto com o apoio do CNPq. Até o III SeedMol, o maior aporte de recursos veio da própria Universidade de Brasília, financiando diversos itens, como as passagens e diárias dos palestrantes.

IV Simpósio de Estrutura Eletrônica e Dinâmica Molecular

O IV SeedMol (Figura 1) reúne diversos pesquisadores nacionais e internacionais, que têm por objetivo estudos de modelagem de diferentes sistemas de interesse, como por exemplo, em catálise, bioinformática, modelagem de fármacos, biocombustíveis, cinética de reações e química ambiental, bem como o desenvolvimento e aplicação de métodos computacionais em química e mecanismos de reações, dentre outros. Os pesquisadores que desenvolvem e aplicam métodos computacionais, nestes diferentes temas, são das áreas de química, física, biologia, computação e matemática.



Figura 1. Logomarca do IV SeedMol.

Esta tem sido uma oportunidade única para a divulgação científica desta área no Centro-Oeste do país, beneficiando grupos de pesquisas nacionais, com a participação de pesquisadores nacionais e internacionais. Assim como nas outras edições, a participação de estudantes e pesquisadores de várias universidades mostra a repercussão do evento. A Figura 2 demonstra a forte abrangência nacional do evento.

A química computacional, através de cálculos de orbital molecular, mecânica molecular e mecânica estatística, apresentou um enorme avanço, desde a presença dos primeiros computadores digitais há mais

de cinquenta anos atrás^{1,2}. Métodos de estrutura eletrônica e modelagem têm-se mostrado uma ferramenta fundamental nos últimos anos³⁻⁹, no desenho de novos sistemas, importantes para o desenvolvimento tecnológico e científico, como por exemplo, na geração de novos catalisadores para craqueamento, geração de novos fármacos usando insumos nacionais, catalisadores para geração de biocombustíveis, bem como a abstração de dióxido de carbono. Nos últimos anos a modelagem tem contribuído para o desenvolvimento de biocombustíveis, como o biodiesel, além da descoberta de novas fontes de energia renovável e estudos com nanomateriais para armazenamento de combustíveis.

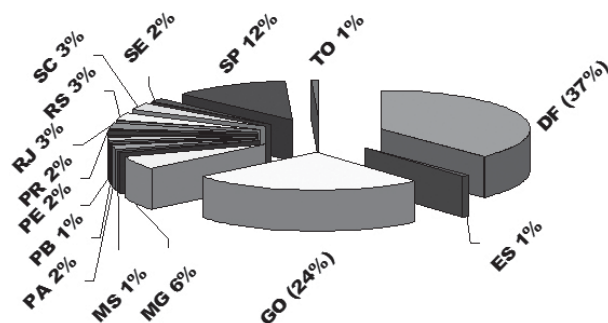


Figura 2. Distribuição dos participantes nacionais, de acordo com o estado.

O cenário mundial em pesquisas e desenvolvimento apresenta uma forte tendência ao uso de ferramentas computacionais para otimizar processos e desenvolver novos materiais e rotas de síntese. A física de estrutura eletrônica e a química computacional possibilitam através da modelagem e simulação a diminuição de gastos em diversas tarefas experimentais, na qual o objetivo almejado é buscar uma melhor previsão dos resultados. Portanto, o simpósio conta com uma participação bastante grande de pesquisadores do país e internacionais. Esperamos com este evento contribuir para a divulgação da pesquisa, a discussão em torno desta importante área, possibilitando assim a difusão do conhecimento.

Público Atingido

Neste IV SeedMol chegamos a cerca de 120 inscritos, entre docentes, pós-doutorandos, alunos de graduação e pós-graduação. Estão confirmadas as presenças de 15 palestrantes, dentre pesquisadores do Brasil, Itália,

USA, Venezuela, Espanha, Japão e Colômbia. Estes pesquisadores estarão apresentando os seus trabalhos em conferências, palestras e pôsteres, enriquecendo o conhecimento dos participantes. As Áreas e o Público Alvo do Simpósio são:

- a) Química computacional e teórica
- b) Biologia Computacional
- c) Bioinformática
- d) Física atômica e molecular
- e) Computação científica
- f) Química Medicinal
- g) Desenvolvimento de novos materiais
- h) Simulação em catálise heterogênea
- i) Nanomateriais
- j) Modelagem e Simulação molecular
- k) Desenvolvimento de métodos e programas em química, física atômica e molecular e bionformática

Programação

Toda programação do IV Simpósio de Estrutura Eletrônica e Dinâmica Molecular, incluindo palestra de abertura, conferências, mini-cursos, mesas-redonda, pode ser vista na Tabela 1 e na Tabela 2.

Comitê Organizador e Científico

Comitê Organizador:

- João B. L. Martins (UnB, Chair)
- José R. dos S. Politi (UnB)
- Ricardo Gargano (UnB)
- Geraldo Magela (UnB)
- Heibbe C. B. de Oliveira (UnB)
- Ademir Camargo (UEG)
- Freddy F. Guimarães (UFG)
- Elton A. S. de Castro (UEG)
- Demétrio A. S. Filho (UnB)

Tabela 1. Programação do IV Simpósio de Estrutura Eletrônica e Dinâmica Molecular

	24/09	25/09	26/09	27/09	28/09
08:20	Ônibus Brasília-Pirenópolis 10:00 e 13:00	Conferência 1	Conferência 5	Conferência 9	8:00-11:30 Mini-cursos V e VI / Coffe-Break
09:00		Palestra 1	Palestra 3	Palestra 5	
09:20		Conferencia 2	Conferencia 6	Conferência 10	
10:00		Coffee-Break	Coffee-Break	Coffee-Break	
10:20		Conferencia 3	Conferencia 7	Conferência 11	
11:00		Palestra 2	Palestra 4	Palestra 6	
11:20		Conferência 4	Conferência 8	Conferência 12	
12:00	Livre	Livre	Livre	Livre	Livre
14:00	Entrega de material Inscrição 14:00-18:00	Mini-cursos I, II, III, IV	Mini-cursos I, II, III, IV		Ônibus Pirenópolis-Brasília 14:00
15:50		Coffee-break	Coffee-Break		
16:10		Mini-cursos V, VI, VII, VIII	Mini-cursos V, VI, VII, VIII		
18:10		Mesa-Redonda 1	Mesa-Redonda 2	Pôsteres	
19:00-21:00	Abertura-Conferência-coquetel				

Tabela 2. Detalhamento da programação do IV Simpósio de Estrutura Eletrônica e Dinâmica Molecular

Palestra de Abertura	Douglas S. Galvão (Unicamp)	Simulando a Natureza: de Nanotubos a Formigas
Conferência 1	Alejandro Toro-Labbé (Chile)	Towards a Theory of Chemical Reactions and Reaction Dynamics Spectroscopy
Conferência 2	Elfi Kraka (USA)	Hydrogen bonded homo - and heterochiral complexes - recognition and discrimination via local vibrational modes
Conferência 3	Dieter Cremer (USA)	Removal of toxic contaminants from the environment – A quantum chemical study with exact two-component relativistic theory
Conferência 4	Andres Reyes Velasco (Colômbia)	Structure and properties of atoms and molecules confined inside fullerenes
Conferência 5	Fernando Ruette (Venezuela)	A dynamic integrative web environment for computational chemistry: IVIChem
Conferência 6	Karen Cacilda Weber (Brasil)	Computer-assisted drug design approaches: from classical to modern and beyond
Conferência 7	Akira Terai (Japão)	Motion of Fractionally Charged Soliton in One-Dimensional Electron- Lattice System with Commensurability 4
Conferência 8	M. Carmen Ruiz Delgado (Espanha)	A combined experimental and theoretical Investigation of the electronic and charge-transport properties of organic semiconductors.
Conferência 9	Hélio A. Duarte (UFMG)	Reatividade Química da Calcopirita - Avanços realizados no âmbito do INCT-ACQUA (Recursos Minerais, Água e Biodiversidade).
Conferência 10	William R. Rocha (UFMG)	Hybrid DFT/EFP studies of P-O Bond Cleavage of Organophosphorus Compounds in Solution.
Conferência 11	Teodorico de Castro Ramalho (UFLA)	Planejamento de agroquímicos e mecanismo de ação: simbiose entre espectroscopia e métodos teóricos
Conferência 12	Vincenzo Aquilanti (Itália)	Molecules at the Mirror – Stereo-dynamics of Chirality
Palestra 1	Marcos S. do Amaral (UFMS)	Computational Molecular Simulation of transesterification reaction for biodiesel production
Mesa-Redonda 1	Pedro A. M. Vazquez (Unicamp)	Ensino de química quântica nos cursos de graduação: desafios e perspectivas
Mesa-Redonda 2	Comitê organizador	Novas fronteiras para o SeedMol
Mini-curso I	6h Marcos S. do Amaral (UFMS)	Dinâmica Molecular: conceitos básicos e aplicações
Mini-curso II	4h Demétrio A. S. Filho (UnB)	Scientific Writing: From Research to Manuscript Preparation and Presentations
Mini-curso III	6h Marcia M. C. Ferreira (Unicamp)	Quimiometria: Análise Multivariada de dados
Mini-curso IV	4h Ademir Camargo(UEG)	Dinâmica Molecular de Car-Parrinello usando ondas planas e pseudopotenciais
Mini-curso V	4h Elaine Rose Maia (UnB)	Previsão de espectros C13, IR e UV/Vis
Mini-curso VI	4h Kleber Carlos Mundim (UnB)	Hartree-Fock: Método SCF e GSA
Mini-curso VII	4h Dieter Cremer/Elfi Kraka(USA)	A new Way of Understanding Chemical Reactions - the Unified Reaction Valley Approach
Mini-curso VIII	4h Sergio A. S. Farias (UFS)	Simulação de sólidos

- Hamilton B. Napolitano (UEG)
- L. Roncaratti (UnB)
- Wiliam F. Cunha (UnB)
- Pedro H. de O. Neto (UnB)
- Alessandra Ferreira Albernaz (UnB)

Comitê Científico:

- Alessandra Ferreira Albernaz (UnB)
- José R. dos S. Politi (UnB)
- Heibbe C. B. de Oliveira (UnB)
- Freddy F. Guimarães (UFG)
- Elton A. S. de Castro (UEG)
- Demétrio A. S. Filho (UnB)
- L. Roncaratti (UnB)
- Wiliam F. Cunha (UnB)
- Pedro H. de O. Neto (UnB)
- Marcos S. Amaral (UFMS)
- Vincenzo Aquilanti (Itália)
- Valter Henrique Carvalho Silva (UEG)

- Mulholland, A. J.; 10, **2005**, 1393-1402.
- Millot, M.; Di Meo, F.; Tomasi, S.; Boustie, J.; Trouillas, P.; J. Photochem. Photobiol. B-Biol., 111, **2012**, 17-26.
- Matsuda, Y.; Hoki, K.; Maeda, S.; Hanaue, K.; Ohta, K.; Morokuma, K.; Mikami, N.; Fujii, A.; Phys. Chem. Chem. Phys., 14, **2012**, 712-719.
- Alves, L. F.; Gargano, R.; Alcanfor, S. K. B.; Romeiro, L. A. S.; Martins, J. B. L.; Chem. Phys. Lett., 516, **2011**, 162-165.
- Longo, V. M.; Gracia, L.; Stroppa, D. G.; Cavalcante, L. S.; Orlandi, M.; Ramirez, A. J.; Leite, E. R.; Andres, J.; Beltran, A.; Varela, J. A.; Longo, E.; J. Phys. Chem. C, 115, **2011**, 20113-20119.
- Nascimento, E. C. M.; Martins, J. B. L.; J. Mol. Model., 17, **2011**, 1371-1379.
- Reddy, R. A.; Zhu, C. H.; Shao, R. F.; Korblova, E.; Gong, T.; Shen, Y. Q.; Garcia, E.; Glaser, M. A.; MacLennan, J. E.; Walba, D. M.; Clark, N. A.; Science, 332, **2011**, 72-77.
- Falcomer, V. A. S.; Lemos, S. S.; Politi, J. R. S.; Casagrande, G. A.; Lang, E. S.; Burrow, R. A.; Inorg. Chem. Commun., 12, **2009**, 580-582.

Referências

- Reimers, J. R. *Computational Methods for Large Systems: Electronic Structure Approaches for Biotechnology and Nanotechnology* Wiley: New Jersey, **2011**.

João B. L. Martins

Instituto de Química, Universidade de Brasília, CP 4478, Brasília, DF, 70904-970

e-mail: lopes@unb.br