

## **CENTRO DE CIÊNCIAS EXATAS E DA NATUREZA**

### **DEPARTAMENTO DE QUÍMICA FUNDAMENTAL**

**ÁREA:** Química Teórica Computacional

**Nº DO PROCESSO:** 23076.024069/2018-88

**CLASSE:** ADJUNTO A

#### **PONTOS**

1. O estado-da-arte na química teórica e computacional;
2. Os desafios atuais da química teórica e computacional;
3. A química teórica e computacional como ferramenta na compreensão de resultados experimentais;
4. Os principais métodos da química teórica e computacional e suas aplicações;
5. Confiabilidade e aplicabilidade dos métodos de química teórica e computacional;
6. Perspectivas no desenvolvimento e implementação de novos métodos de química teórica e computacional;
7. Tratamento de sistemas químicos grandes pela química teórica e computacional;
8. Tratamento de interfaces pela química teórica e computacional;
9. Evolução da química teórica e computacional: de sistemas estáticos para sistemas dinâmicos;
10. Técnicas de química teórica e computacional para o tratamento de sistemas amorfos.