



Universidade Federal da Paraíba  
Centro de Ciências Exatas e da Natureza  
Programa de Pós-Graduação *Stricto Sensu* em Física

# Colóquio

## “Estrutura Eletrônica de Líquidos e Fluidos Supercríticos”

**RESUMO:** O estado líquido tem sido o menos estudado entre os estados da matéria. Entretanto, o estado líquido é essencial em diversos processos moleculares. Destaque-se que a água é o solvente biológico e participa em todos os processos moleculares relacionados à vida. A interação de uma molécula, com outras moléculas de um meio líquido, modifica suas propriedades comparadas com a molécula isolada. A compreensão dessas mudanças é fundamental para racionalizar experimentos tanto em Física quanto em Química e Biologia. Devido à complexidade de um sistema líquido, cujas propriedades são estatísticas, e da necessidade de incorporar efeitos quânticos para entender a estrutura eletrônica, o estudo de sistemas líquidos é complexo, mas grandes progressos têm sido obtidos nos últimos anos. Isto se deve em grande parte à capacidade de simulação computacional. A combinação de mecânica quântica e mecânica estatística (que leva aos métodos híbridos conhecidos como QM/MM) representa uma aliança necessária e poderosa para se estudar sistemas moleculares em meio líquido. Nesta apresentação discutiremos coloquialmente esses problemas. Mostraremos a implementação de um protocolo quântico-estatístico e apresentaremos alguns resultados para processos moleculares em solução e mudanças espectroscópicas devido à interação com um meio líquido a uma dada temperatura finita incluindo condições regulares e fluidos supercríticos.

Prof. Dr. Sylvio Canuto  
USP

20/set/2013

15h00

Auditório da Pós-Graduação em Física  
(novo prédio)