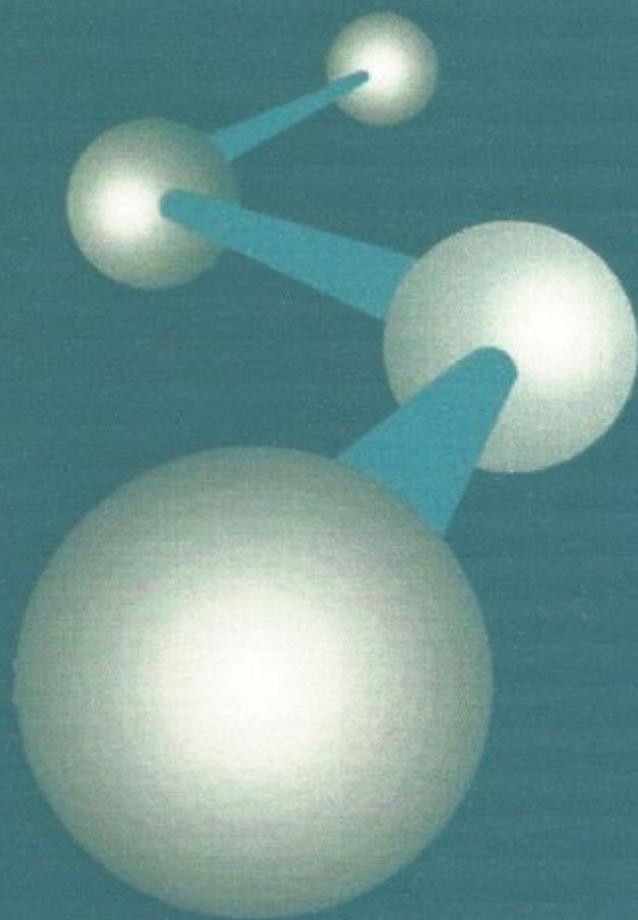


# I SEEDMOL - DF

## 2006



I Simpósio de Estrutura Eletrônica e Dinâmica Molecular do Distrito Federal

### LIVRO DE RESUMOS

Brasília, 13 a 15 de fevereiro de 2006

<i>Horário</i>	13 fev (seg)
8h40 - 9h10	<b>ABERTURA</b>
9h10 - 10h10	Palestra de abertura: Hans Lischka - Universidade de Viena - "Ab initio nonadiabatic photodynamics: from the C=C bond to retinal models and DNA bases"
10h10 - 10h30	<b>INTERVALO</b>
10h30 - 11h00	PALESTRA 1: Kleber C. Mundim - q-Hartree-Fock: Uma Formulação Alternativa para Cálculos de Estrutura Eletrônica
11h00 - 11h20	PALESTRA A: Luciano Ribeiro - Formalismo Auto-Consistente e o método Generalized Simulated Annealing no estudo da difração de Raios-X em argila sintética fluorohectorita
11h20 - 11h40	PALESTRA B: Erica C. M. Nascimento - Estudo das estruturas das drogas potencialmente inibidoras da AchE
11h00 - 12h00	PALESTRA C: Gisele F. Esteves - Boas práticas laboratoriais em cristalografia de macromoléculas biológicas
12h00 - 14h30	<b>A L M O Ç O</b>
14h30 - 15h00	PALESTRA 2: Marçal de Oliveira Neto - Uma Abordagem Sobre os Modelos da Química Quântica em Cosmologia
15h00 - 15h30	PALESTRA 3: Luiz Guilherme M. de Macedo - Química Quântica Relativística Aplicada
15h30 - 16h00	PALESTRA 4: Oyanarte Portilho - Um novo modelo para o balanço de Chandler: resultados preliminares
16h00 - 16h20	<b>INTERVALO</b>
16h20 - 16h50	PALESTRA 5: P. R. P. Barreto - Kinetic mechanisms for boron nitride growth from the vapor phase
16h50 - 17h10	PALESTRA D: Simone S. Ramalho - Theoretical study of the $NF_3 + F$ : two reaction channels
17h10 - 17h30	PALESTRA E: Antonio Donizete Braga - Estudo teórico da ligação de hidrogênio em dímeros usando métodos teóricos
17h30 - 17h50	PALESTRA F:

## **Uma Abordagem Sobre os Modelos da Química Quântica em Cosmologia**

*Marçal de Oliveira Neto (PQ)*

*Instituto de Química – Universidade de Brasília  
Campus Universitário Darcy Ribeiro – Asa Norte  
70904-970 – Brasília-DF*

*Teoria Atômica, Quantizações, Órbitas Planetárias.*

Será apresentado um modelo simples de quantização de órbitas planetárias no panorama de um modelo atômico análogo ao modelo de Bohr onde os inteiros desempenham papel primordial. As distâncias médias planetárias bem como os períodos de revolução planetários e dos asteróides que delimitam os cinturões encontrados em nosso sistema solar encontram – se em acordo bastante satisfatório com os raios médios planetários e períodos observados. Será igualmente mostrado que os raios médios planetários podem ser calculados a partir das soluções de uma equação similar à equação de Schrödinger considerando o sistema solar como um disco planar. Este modelo prevê um “estado fundamental” associado a um raio médio de 0.05UA, distância esta em que é encontrado um grande número de planetas em sistemas extra-solares. No entanto, para ambos os modelos estudados é necessário somente o raio médio de Mercúrio como parâmetro de entrada para a obtenção de todo restante das distâncias médias dos planetas / asteróides do centro do Sol. Uma perspectiva para o estudo de sistemas binários de estrelas no âmbito dos modelos da Química Quântica utilizados para o tratamento do íon molecular  $H_2^+$  será igualmente apresentada.

# I SEEDMOL - DF

I Simpósio de Estrutura Eletrônica e Dinâmica Molecular do Distrito Federal

Certificamos que:

Marçal de Oliveira Neto

participou, com apresentação da palestra

Uma Abordagem Sobre os Modelos da Química Quântica em Cosmologia

do **I SEEDMOL - DF.**

Brasília, 15 de fevereiro de 2006

**Comissão Organizadora**