

Primeira Chamada
International Workshop on Density Functional Theory – Present and Future Challenges
(13-14 de Maio de 2010)
e
10th deMon developers Workshop
(15-18 de Maio de 2010).

<http://demon2010.ufmg.br>

Temos o prazer em informar que o “10th deMon developers workshop” será realizado em Belo Horizonte, nas dependências do Departamento de Química da UFMG, Belo Horizonte.

Nesta edição, o “International Workshop on Density Functional Theory – Present and Future Challenges” será realizado em conjunto com o 10th deMon developers workshop. Trata-se de um workshop voltado para o desenvolvimento metodológico no âmbito da Teoria do Funcional de Densidade.

O público alvo são pesquisadores interessados e envolvidos no desenvolvimento da metodologia. O comitê científico elegeu os seguintes temas a serem enfatizados nesta edição:

- Método aproximado DFTB
- Método híbrido QM/MM
- Método híbrido totalmente quântico QM/QM'
- Dinâmica molecular
- Ferramentas de análise (Visualização, NBO, teoria AIM de Bader)
- Propriedades (TD-DFT, NMR, EPR, Circular Dicroísmo).
- “Large scaling” systems – Cálculo de sistemas enormes.

Tendo em vista as limitações de espaço e também para garantir que o workshop alcance os seus objetivos de promover o intercâmbio e colaboração entre pesquisadores, o número de inscrições será limitado.

Cerca de 20 palestrantes estrangeiros já foram confirmados.

No mês de fevereiro de 2010, o prazo para inscrição será divulgado.

Atenciosamente;

Hélio Anderson Duarte.