



Sumário

Número Especial em Estrutura Eletrônica e Dinâmica Molecular
Special Issue in Electronics Structure and Molecular Dynamics

Editorial

João B. L. Martins, José Walkimar M. Carneiro

311-312

DOI: [10.5935/1984-6835.20160022](https://doi.org/10.5935/1984-6835.20160022)

Artigos



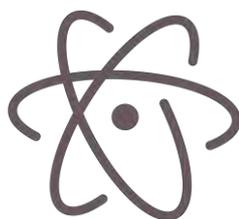
Desenvolvimento de um Programa para Cálculo do Fator de Escala Vibracional

Development of a Program to Calculate Vibrational Scale Factor

313-318

David Wesley A. da Silva, Francisco Romário L. Belém, Diniz M. de Sena Jr.

DOI: [10.5935/1984-6835.20160023](https://doi.org/10.5935/1984-6835.20160023)

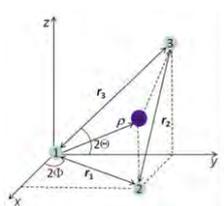


Teoria Quântica: Uma Abordagem Quantizada da sua Evolução – Parte I
Quantum Theory: An Approach Quantized on its Evolution – Part I

Fernanda K. C. Félix, Pedro G. B. Bonfim, Lucas S. S. Santos, Douglas Henrique Pereira

319-337

DOI: [10.5935/1984-6835.20160024](https://doi.org/10.5935/1984-6835.20160024)



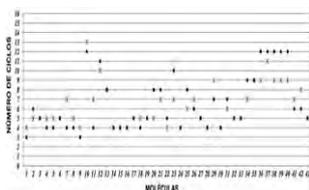
Superfície de Energia Potencial em Coordenadas Hiperesféricas do Complexo He₃

Hyperspherical Coordinate Potential Energy Surface for the He₃ Complex

338-355

Alessandra Ferreira Albernaz, Patrícia R. P. Barreto

DOI: [10.5935/1984-6835.20160025](https://doi.org/10.5935/1984-6835.20160025)



Estratégias para a Redução do Custo Computacional no Processo de Otimização das Geometrias do Estado Fundamental e do Primeiro Estado Excitado de Moléculas Orgânicas

Strategies to Reduce the Computational Cost of the Ground State and the First Excited State Geometry Optimization of Organic Molecules

356-368

Kamilla F. Cândido, Simone S. Ramalho, Wiliam F. da Cunha, Demétrio A. da Silva Filho

DOI: [10.5935/1984-6835.20160026](https://doi.org/10.5935/1984-6835.20160026)



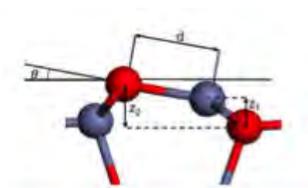
Quercetina na Melhora do Estresse Oxidativo/Nitrosativo no Cérebro de Ratos Expostos a Hipóxia Hipobárica Intermitente

Quercetin Ameliorate Oxidative/Nitrosative Stress in The Brain of Rats Exposed to Intermittent Hypobaric Hypoxia

369-383

Irina Camelia Chiş, Doina Baltaru, Anca Dumitrovici, Andrei Coseriu, Bogdan Cristian Radu, Remus Moldovan, Adriana Mureşan

DOI: [10.5935/1984-6835.20160027](https://doi.org/10.5935/1984-6835.20160027)



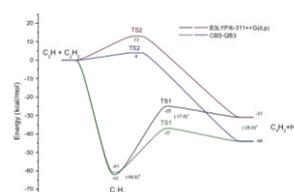
Estudo Teórico dos Parâmetros de Modelagem da Superfície Apolar do Óxido de Zinco

Theoretical Study of Modeling Parameters for the Non-Polar Zinc Oxide Surface

384-393

Ítalo P. de Lima, João B. L. Martins

DOI: [10.5935/1984-6835.20160028](https://doi.org/10.5935/1984-6835.20160028)



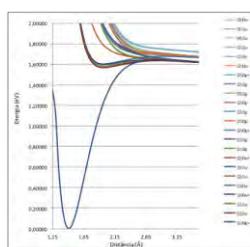
Estudo do Mecanismo Cinético da Reação $C_2H + C_2H_2$ via TST

Kinetic Mechanism Study of Reaction $C_2H + C_2H_2$ via TST

394-404

Washington B. da Silva, Alessandra F. Albernaz

DOI: [10.5935/1984-6835.20160029](https://doi.org/10.5935/1984-6835.20160029)



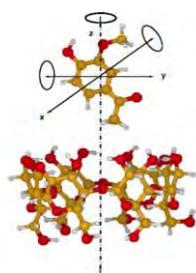
Estudo Teórico dos 23 Estados Covalentes da Molécula F_2 através da Metodologia Relativística MRCI de 4 Componentes

Theoretical Study of 23 Covalent States of the F_2 Molecule by Relativistic Methodology MRCI 4 Components

405-416

Alan R. S. Lima, João Augusto P. da Rocha, Davi Henrique T. Amador, Luiz G. M. de Macedo

DOI: [10.5935/1984-6835.20160030](https://doi.org/10.5935/1984-6835.20160030)



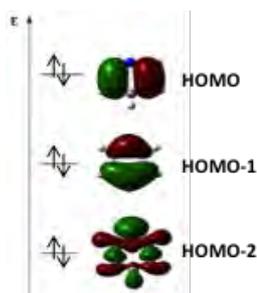
Interação entre o Dímero de Apocinina e Ciclodextrina

Interaction between Apocynin Dimer and Cyclodextrin

417-424

Aguinaldo R. de Souza, Nelson H. Morgon

DOI: [10.5935/1984-6835.20160031](https://doi.org/10.5935/1984-6835.20160031)



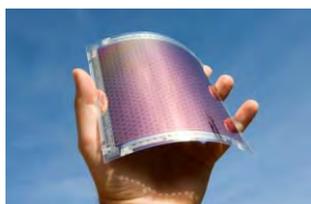
Novas Perspectivas sobre o Papel dos Orbitais Moleculares de Fronteira no Estudo Da Reatividade Química: Uma Revisão

New Perspectives on the Role of Frontier Molecular Orbitals in the Study of Chemical Reactivity: A Review

425-453

Douglas Henrique Pereira, Felipe A. La Porta, Regis Tadeu Santiago, Danielle R. Garcia, Teodorico C. Ramalho

DOI: [10.5935/1984-6835.20160032](https://doi.org/10.5935/1984-6835.20160032)



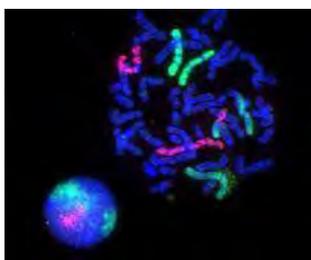
Estudos Teóricos de Oligômeros Aplicados na Composição de Células Fotovoltaicas ou Diodos Orgânicos Emissores de Luz

Theoretical Studies of Oligomers Used in the Composition of Photovoltaic Cells or Organic Lighting Emitting Diodes

454-465

Simone S. Ramalho, Kamilla F. Cândido, Alessandra Albernaz

DOI: [10.5935/1984-6835.20160033](https://doi.org/10.5935/1984-6835.20160033)



Processo De Transferência Protônica Intramolecular no Estado Excitado (ESIPT): Aplicações em Sondas Fluorescente

Intramolecular Proton Transfer in the Excited State (ESIPT) Process: Applications in Fluorescent Probes

466-482

Eduardo P. da Rocha, Teodorico C. Ramalho

DOI: [10.5935/1984-6835.20160034](https://doi.org/10.5935/1984-6835.20160034)



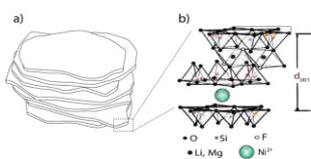
Índices de Reatividade da Molécula de Cafeína

Chemical Reactivity Indices of the Caffeine Molecule

Antonio L. de Almeida, Luane P. G. Barbosa, Rebeca L. Santos, João B. L. Martins

483-492

DOI: [10.5935/1984-6835.20160035](https://doi.org/10.5935/1984-6835.20160035)



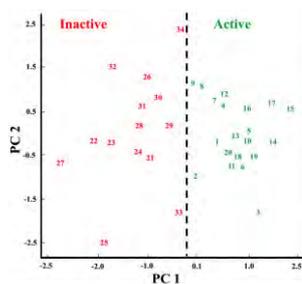
Análise da Reflexão 001 da Níquel-Fluorohectorita por Difração de Raios X Síncrotron

Analysis of the 001 Reflection of Nickel-Fluorohectorite by Synchrotron X-Ray Diffraction

493-505

Jeane S. de Oliveira, Leander E. Michels, Marcelo Henrique Sousa, Jon Otto Fossum, Geraldo José da Silva, Kleber Carlos Mundim, Luciano Ribeiro

DOI: [10.5935/1984-6835.20160036](https://doi.org/10.5935/1984-6835.20160036)

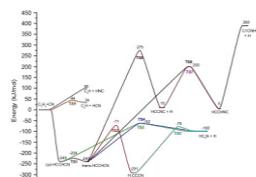


Um Estudo Químico Quântico e Quimiométrico da *Styrylbenzylsulfones* e seus Análogos com Atividade Citotóxica contra Células do Câncer de Próstata

A Quantum Chemical and Chemometrical Study of Styrylbenzylsulfones and their Analogues with Citotoxic Activity against Prostate Cancer Cells 506-514

Daiane L. dos Santos, Camila B. Paula, Valter Henrique Carvalho-Silva, Ademir J. Camargo, Lilian T. F. M. Camargo

DOI: [10.5935/1984-6835.20160037](https://doi.org/10.5935/1984-6835.20160037)

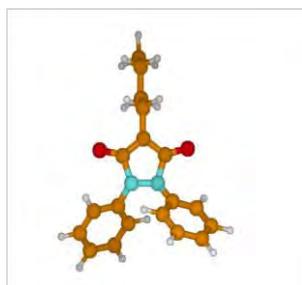


Previsão de Novos Canais de Reação para o $CN + C_2H_2$

Predicting New Pathways for the Reaction $CN + C_2H_2$

Washington B. da Silva, Ricardo Gargano, Geraldo M. e Silva, Alessandra F. Albernaz 515-524

DOI: [10.5935/1984-6835.20160038](https://doi.org/10.5935/1984-6835.20160038)

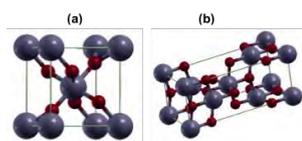


Estudo da Estabilidade Relativa dos Tautômeros da Fenilbutazona e Cálculo Dos Espectros UV-Vis e ECD

Study of relative stability of tautomeric forms of phenylbutazone and calculation of UV-Vis and ECD spectra 525-535

Aguinaldo R. de Souza, Valdecir F. Ximenes, Nelson H. Morgon

DOI: [10.5935/1984-6835.20160039](https://doi.org/10.5935/1984-6835.20160039)

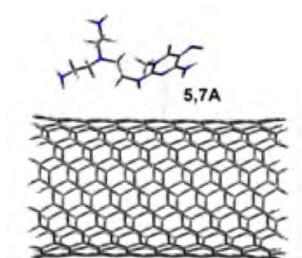


Otimização de Parâmetros de Corte em Cálculos Periódicos DFT de Ondas Planas para Superfícies (110) Rutilo e (101) Anatase do TiO_2

Optimization of Cutoff Parameters Using DFT Periodic Calculations for (110) Rutile and (101) Anatase TiO_2 Surfaces 536-548

Marcos R. Vargas, Elton Anderson S. de Castro, José Roberto S. Politi, João B. L. Martins

DOI: [10.5935/1984-6835.20160040](https://doi.org/10.5935/1984-6835.20160040)



Estudo Experimental e Teórico da Interação do N-2-(4-Amino-1,6-Dihidro-1-Metil-5-Nitroso-6-Oxopirimidinil)-Tris-(2-Aminoetil) Amina com Nanotubo de Carbono

Experimental and Theoretical Study of the Interaction of N-2-(4-Amine-1.6-Dihydro-1-Methyl-5-Nitroso-6-Oxopirimidinil) Tris-(2-Aminoethyl) Amine with Carbon Nanotube 549-558

Maiko S. Feitosa, Daniel Augusto B. de Oliveira, Rafael Dionisio López-Garzón, Maria L. Godino-Salido

DOI: [10.5935/1984-6835.20160041](https://doi.org/10.5935/1984-6835.20160041)

A **Revista Virtual de Química** é uma publicação eletrônica, sem fins lucrativos, com difusão gratuita na Internet via a World-Wide Web da **Sociedade Brasileira de Química** e visa, principalmente, ser uma fonte de consulta e de divulgação na língua portuguesa ou inglesa para alunos e professores do ensino médio e fundamental, graduação e pós-graduação.

Os manuscritos deverão ser submetidos on-line em uma das seguintes seções: artigos (inéditos, de divulgação ou revisão), atualidades na química brasileira, perfil acadêmico e trajetória científica, *In focus*, métodos de preparação industrial de solventes e reagentes químicos, nomenclatura em química, notícias e debates, ou resenhas.

Para publicação, requer-se que os manuscritos submetidos não tenham sido publicados anteriormente e não sejam submetidos ou publicados simultaneamente em outro periódico.

O conteúdo dos artigos aqui publicados é de responsabilidade dos respectivos autores.

Os direitos autorais para artigos publicados nesta revista são do autor, com direitos de primeira publicação para a revista. Em virtude de aparecerem nesta revista de acesso público, os artigos são de uso gratuito em aplicações educacionais e não-comerciais, devendo-se citar a *Revista Virtual de Química* e os autores.

A revista tem periodicidade bimestral e os artigos aceitos serão publicados como "artigos no prelo" e coletivamente após o sumário pronto com todos os artigos do número formatados e paginados.

Instruções detalhadas aos autores estão disponíveis no sítio da RVQ.

Editores Convidados Nº 2 Vol 8: João B. L. Martins (UnB) e José Walkimar M. Carneiro (UFF)

Editores Convidados Nº 2 Vol 8: João B. L. Martins (UnB) e José Walkimar M. Carneiro (UFF)

Editoração final: Fernando de Carvalho da Silva

Capa: é uma obra de Ana Paula Campos de Oliveira, filha de Portugueses, nasceu em Niterói a 25 de Janeiro de 1971. Em 1980 se mudou para a cidade da Póvoa de Varzim, Portugal, com a família. Fez curso de artes decorativas, atualmente se dedica a uma antiga paixão, Azulejos Portugueses.

Equipe Editorial

Editores

Fernando de Carvalho da Silva (Coordenador), UFF
Eliezer Jesus de Lacerda Barreiro, UFRJ
José Abrunheiro da Silva Cavaleiro, Universidade de Aveiro
Lídia Moreira Lima, UFRJ
Ricardo Bicca de Alencastro, UFRJ
Vitor Francisco Ferreira, UFF

Editor Honorário

Angelo da Cunha Pinto[†], UFRJ

Editores Associados

Alessandro Kappel Jordão, UEZO
Bárbara Vasconcellos da Silva, UFRJ
Bluma Guenther Soares, UFRJ
David Rodrigues da Rocha, UFF
Francisco Carlos Rocha de Barros Junior, UFBA
Frederico Silva Castelo Branco, FIOCRUZ
Maria Helena de Araújo, UFMG
Nubia Moura Ribeiro, IFBA
Tanos Celmar França, IME-RJ

Editores Associados Jr

Débora França de Andrade, UFRJ
Lilian Guarieiro, SENAI CIMATEC
Sabrina Martinez, UFRJ

Corpo Editorial

Aurea Echevarria, UFRJ
Carolina de Mattos Duarte, Université Louis Pasteur
Claudia Moraes Rezende, UFRJ
Cláudio José de Araújo Mota, UFRJ
Cristiano Ruch Werneck Guimarães, Pfizer Inc.
Jailson Bittencourt de Andrade, UFBA
Jorge Almeida Guimarães, UFRGS
José Daniel Figueroa Villar, IME-RJ
Luiz Carlos Dias, UNICAMP
Paulo Anselmo Ziani Suarez, UnB
Pier Giovanni Baraldi, Università di Ferrara
Raimundo Braz Filho, UENF
Raquel Gonçalves Maia, Universidade de Lisboa
Ricardo Erthal Santelli, UFRJ
Rodrigo Octavio de Souza, UFRJ
Sabrina Baptista Ferreira, UFRJ
Simon Campbell, Royal Society of Chemistry
Sonia Soares Costa, UFRJ
Stefan Laufer, Universität Tübingen
Warner Bruce Kover, UFRJ

Data de publicação: 18 de abril de 2016

<http://rvq.sbq.org.br>

E-mail: rvq@sbq.org.br

Sociedade Brasileira de Química