

Editorial

TÍTULO: Número Especial em Estrutura Eletrônica e Dinâmica Molecular

O V Simpósio de Estrutura Eletrônica e Dinâmica Molecular (V SeedMol) foi realizado de 15-19 de setembro de 2014, na Pousada dos Pireneus Resort. A sua logomarca permanece a mesma desde a primeira edição (Figura 1). O evento tem por objetivo agregar pesquisadores e estudantes da área de modelagem

de diferentes sistemas de interesse, como por exemplo, em catálise, bioinformática, modelagem de fármacos, biocombustíveis, cinética de reações, química ambiental, bem como o desenvolvimento e aplicação de métodos computacionais em química. Os pesquisadores que desenvolvem e aplicam métodos computacionais são em geral das áreas de química, física, biologia, computação e matemática. A 5ª edição deste evento tem como objetivo prover um fórum amplo para estudos e debates. São dez anos trilhando a disseminação do conhecimento das áreas correlatas de química teórica e modelagem molecular. Portanto, torna-se importante vislumbrar um pouco da trajetória do simpósio.



SEEDMOL
SIMPÓSIO DE ESTRUTURA ELETRÔNICA E DINÂMICA MOLECULAR

Figura 1. Logomarca do SeedMol

A primeira edição ocorreu como SeedMol-DF. Uma ideia nascida entre o Instituto de Física e o Instituto de Química da Universidade de Brasília, que logo teve o apoio do Instituto Biologia, além da Universidade Católica de Brasília, Universidade Federal de Goiás e Universidade Estadual de Goiás. Nesta 1ª Edição participaram não somente pesquisadores do Centro-Oeste, mas também proveniente de outras partes do Brasil, com instituições como: USP, INPE e Unesp. O formato do I SeedMol foi caracterizado por comunicações orais de discentes, com um total de 19 palestras de alunos de graduação e pós-graduação e 19 palestras de pesquisadores. Foram 76 inscritos, o evento ocorreu de 13-15 de fevereiro de 2006 na Universidade de Brasília. O financiamento foi totalmente da UnB.

A novidade do II SeedMol foi acrescentar um módulo de mini-cursos e estender o evento de três para cinco dias, ocorrendo de 25-29 de fevereiro de 2008. Estava então caracterizado como um evento bianual. O II SeedMol contou com a presença de quatro pesquisadores estrangeiros e também de nomes chaves da pesquisa brasileira. Foram 90 inscritos no II SeedMol e novamente a UnB promoveu

o evento. Até o II SeedMol, o total do aporte de recursos veio da própria Universidade de Brasília.

A partir do III SeedMol o evento foi transferido para o segundo semestre do ano, já com um perfil mais consolidado de palestras e minicursos. O III SeedMol, também realizado na Universidade de Brasília, foi de 13 a 17 de outubro de 2008. Contou com a presença de diversos pesquisadores internacionais: Itália, Venezuela, Colômbia, Chile, Argentina e Espanha. Foram 15 palestrantes de alto nível. Foi acrescentada uma nova forma de debate no evento, através de duas mesas-redondas, que contribuíram para a discussão de temas relevantes da pesquisa e formação de recursos humanos. A integração da mesa-redonda foi uma ótima iniciativa propiciando discutir dois temas relevantes para a química teórica, novas alternativas ao método Hartree-Fock e softwares livres. Na III Edição houve o apoio à eventos da CAPES/PAEP, que foi fundamental para a consecução dos objetivos, junto com o apoio do CNPq.

O IV SeedMol reuniu diversos pesquisadores nacionais e internacionais. Nesta edição a novidade ficou por conta do local do evento, que foi transferido

para a cidade histórica de Pirenópolis. Outra novidade foi a primeira edição especial dos trabalhos do evento na Revista Processos Químicos. Outro fato importante foram os cursos em inglês, de pesquisadores renomados do cenário internacional. O apoio financeiro veio da CAPES, CNPq, FAPEG e UnB. De novo, duas mesas-redondas incorporaram ao evento com importantes discussões. Neste IV SeedMol chegamos a cerca de 120 inscritos, entre docentes, pós-doutorandos, alunos de graduação e pós-graduação. Com a presença de 15 palestrantes, dentre pesquisadores do Brasil, Itália, USA, Venezuela, Espanha, Japão e Colômbia, que apresentaram os seus trabalhos em conferências, palestras e pôsteres, enriquecendo o conhecimento dos participantes.

Daí se tornou um evento consolidado, com uma expressiva repercussão dentre os participantes, atingindo um excelente grau de satisfação com relação à divulgação científica. Neste V SeedMol, conforme mostrado na Figura 2, a maioria dos participantes é procedente do Centro-Oeste. Um dos elementos importantes nesta V Edição foi o apoio na organização, proveniente de pesquisadores da Universidade Estadual de Goiás (UEG) e da Universidade Federal de Goiás (UFG), além da UnB. As agências que apoiaram foram o CNPq, a FAPEG e a CAPES. A novidade nesta edição foi uma mesa de abertura com duas palestras sobre o mesmo ponto, nanomateriais, uma abordagem teórica e outra experimental. A consolidação deste evento é mostrada pelo número de inscritos, foram 111 inscritos. Esta tem sido uma oportunidade para a divulgação científica desta área no Centro-Oeste do país, beneficiando grupos de pesquisas nacionais, com a participação de pesquisadores nacionais e internacionais. Assim como nas outras edições, a participação de estudantes e pesquisadores de várias universidades mostra a repercussão do evento.

Diante deste quadro, no V SeedMol foi avaliado que a qualidade e a quantidade da produção apresentada no evento, poderia ser traduzida numa edição especial, com artigos originais dos trabalhos do V SeedMol. Neste sentido, os trabalhos publicados nesta Edição Especial da Revista Virtual de Química refletem o estado do SeedMol, com excelentes trabalhos nas mais diferentes aplicações, além de trabalhos em fundamentação.

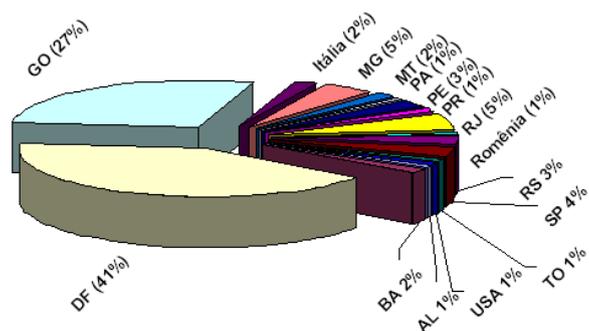


Figura 2. Distribuição dos participantes, de acordo com a localidade

Agradecimentos: CNPq, CAPES, FAPEG, UnB, UEG, UFG.

João B. L. Martins^a
José Walkimar M. Carneiro^b



^a Universidade de Brasília, Instituto de Química, Caixa Postal 4478, Campus Universitário, CEP 70904-970, Brasília-DF, Brasil.

E-mail: lopes@unb.br

^b Universidade Federal Fluminense, Instituto de Química, Campus do Valonguinho, CEP 24020-150, Niterói-RJ, Brasil.

E-mail: walk@vm.uff.br

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.

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