

**PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM QUÍMICA**  
**SEMINÁRIOS**

**2019/2 – PPGQ / SEM I e II**

---

**DATA:**

27/11/19

---

**PALESTRANTE:**

Dr. Matteo Briganti

Pós-doutorando do Programa de Internacionalização (PrInt/CAPES) no Departamento de Química da Universidade Federal do Paraná – UFPR

---

**INSTITUIÇÃO:**

Università degli Studi di Firenze – Florença, Itália

---

**TÍTULO DA PALESTRA:**

*"E quindi uscimmo a riveder le stelle"*: Uma viagem dantesca através da química inorgânica computacional.

---

**RESUMO:**

Nas últimas décadas, na área da química os cálculos *ab initio* provaram ser uma ferramenta fundamental para entender processos, direcionar experimentos, descobrir fenômenos. No entanto, quando estão envolvidos metais de transição e lantanídeos, as coisas ficam ainda mais complicadas devido à fascinante, porém desafiadora, estrutura eletrônica desses elementos, estrutura resultante dos orbitais 3d e 4f semi-cheios. Como consequência, com elementos dos blocos d e f, as teorias modernas de função de onda podem ser a única conexão confiável entre várias e diferentes técnicas experimentais. Em todos os campos da química inorgânica, da espectroscopia molecular à eletroquímica, da resolução de metaloproteínas à síntese de novos materiais moleculares, a bússola computacional mostrou-se necessária para orientar a atividade científica através do 'Infernal' universo químico. Atualmente, seguindo nosso teórico Virgílio, podemos investigar se ocorrem reações, como as interfaces interagem, quais orbitais estão envolvidos.

No entanto, é preciso cautela: teoria e experimentos dependem um do outro. Interpretações excessivamente simplificadas dos experimentos são enganosas, mas também a confiança cega nos resultados de uma simulação é um pecado fatal. Somente um ciclo contínuo de *feedback* autocrítico entre teoria e experimento é a verdadeira força motriz do conhecimento científico. A teoria é linda e poderosa, mas os cientistas precisam estar totalmente conscientes de seus limites: caso contrário, o oitavo círculo do 'Inferno' de Dante Alighieri (onde os falsificadores são condenados) nos espera.