

Simulação Atomística

Prof. James Moraes de Almeida



- Como calcular espectros UV-VIS no ORCA
 - Sigam esse tutorial:
 - <https://www.faccts.de/docs/orca/6.0/tutorials/spec/UVVis.html>
 - Vocês podem fazer o cálculo para alguma molécula que vocês já mediram o UV-VIS.
 - Para comparar com o resultado experimental.
 - Também pode ser outra molécula que você encontrarem o resultado experimental.
 - Tentem escolher moléculas com menos de 30 átomos.

OBRIGADO

James Moraes de Almeida



ilum.cnpem.br



MINISTÉRIO DA
EDUCAÇÃO

MINISTÉRIO DA
CIÊNCIA, TECNOLOGIA
E INOVAÇÃO



MINISTÉRIO DA
EDUCAÇÃO

MINISTÉRIO DA
CIÊNCIA, TECNOLOGIA
E INOVAÇÃO

