




[INÍCIO](#) [CIDADE E LOCAL](#) [COMISSÕES](#) [PALESTRANTES](#) [PROGRAMAÇÃO](#) [MINICURSOS](#)  
[INSCRIÇÕES](#) [TRABALHOS](#) [ANAIS](#) [CONTATO](#) 

PAINEL DO INSCRITO



# XXIII SIMPÓSIO BRASILEIRO DE QUÍMICA TEÓRICA



## BOAS VINDAS!



2025 é um ano especial para a nossa área, pois são 100 anos da Mecânica Quântica. Comemoramos essa data tão importante em Bento Gonçalves, no Rio Grande do Sul, de 10 a 13 de novembro de 2025. Por isso, o pórtico de entrada da cidade, um barril que representa a produção vinícola da região, aparece em nosso logo com as densidades de probabilidade para a partícula na caixa.

Adicionalmente, em 2024, comemoramos os 100 anos do potencial de Lennard-Jones. Assim, para celebrar todos esses "aniversários", nosso evento contará com uma ampla programação dividida em eixos que abarcam diferentes temáticas de nossa área: desde desenvolvimento de métodos e algoritmos, passando propriedades moleculares e espectroscopia, reatividade (mecanismos e catálise), sistemas biológicos e química medicinal. Métodos baseados em mecânica quântica, clássica, híbridos e machine learning serão explorados nos eixos nas mais diversas aplicações.

A programação inclui conferências plenárias, palestras convidadas, comunicações orais e pôsteres de pesquisadores brasileiros e convidados estrangeiros. Esta é uma oportunidade para criar colaborações e compartilhar experiências. Neste sentido, teremos ainda um espaço de divulgação científica e interação com a comunidade local (e visitantes), no sentido de divulgar a área de química teórica e computacional, particularmente visando desmitificar a mecânica quântica. E para aqueles que já são da área, teremos uma mesa redonda para discussão dos campos de atuação do químico teórico-computacional, inclusive fora da academia.

**JUNTE-SE A NÓS NA COMEMORAÇÃO E VENHA PARTICIPAR DO MAIOR EVENTO DE QUÍMICA TEÓRICA E COMPUTACIONAL DA AMÉRICA LATINA!**

### ONDE

**Dall'Onder Grande Hotel**  
**Bento Gonçalves, RS, Brasil**

### QUANDO

**De 10 a 13 de Novembro de 2025**

### INSCREVA-SE

### SOBRE A CIDADE

## BENTO GONÇALVES, RS, BRASIL

O Simpósio Brasileiro de Química Teórica (SBQT) de 2025 acontecerá em novembro, em Bento Gonçalves, Rio Grande do Sul. Este evento é fundamental para a comunidade científica, reunindo pesquisadores e estudantes para discutir os avanços em Química Teórica. Bento Gonçalves, conhecida pela produção de vinhos e herança cultural italiana, oferece um cenário único, combinando ciência e turismo. A realização do SBQT na cidade promove o desenvolvimento local e amplia a troca de conhecimento, tornando o evento memorável tanto pelo conteúdo científico quanto pela hospitalidade da região.

Bento Gonçalves está na Serra Gaúcha, a pouco mais de 120 quilômetros de Porto Alegre, praticamente a mesma distância de Gramado e Canela, e cerca de 50 quilômetros de Caxias do Sul. Para quem vem de outros estados, a maneira mais fácil de chegar a Bento Gonçalves é voando até o Aeroporto de Caxias do Sul ou até o Aeroporto de Porto Alegre. O evento será realizado no Dall'Onder Grande Hotel. Situado em uma das principais avenidas da cidade, o Hotel fica a 1,5Km do centro da cidade.

# *Ab Initio* Insights into Electronic–Catalytic Relations in Iridium-Based Catalysts for Water Splitting

Marionir M. C. B. Neto, Pedro Ivo R. Moraes, and Juarez L. F. Da Silva

São Carlos Institute of Chemistry, University of São Paulo, Av. Trabalhador São-Carlense 400, 13560-970, São Carlos, SP, Brazil.

The development of efficient electrocatalysts is vital for enabling scalable green hydrogen production, particularly through the water-splitting reaction. In this study, we employ density functional theory calculations to investigate the bifunctional catalytic behavior of Iridium-based materials across both the hydrogen evolution reaction (HER) and the oxygen evolution reaction (OER). Ir(111), Ir(100), IrO<sub>2</sub>(110), IrO<sub>2</sub>(110),  $\alpha$ -Ir<sub>2</sub>O<sub>3</sub>(0001) and  $\alpha$ -Ir<sub>2</sub>O<sub>3</sub>(10-10) were modeled to explore the influence of surface coordination on adsorption energetics. Within the thermodynamic framework of the Computational Hydrogen Electrode model, we systematically evaluated intermediate adsorption and overpotentials. Performing HER, we observe that metallic Ir, lacking oxygen orbitals, exhibits weaker hybridization with hydrogen species and lower binding energies, placing it near the HER volcano optimum. In contrast, Ir oxides display enhanced hydrogen binding due to stronger orbital overlap. We identify the energy difference between Ir *d*-band and O *p*-band centers ( $\Delta\varepsilon = \varepsilon_d - \varepsilon_p$ ) as a key electronic descriptor inversely correlated with HER activity, reflecting the degree of metal–oxygen orbital mixing. In the case of OER, IrO<sub>2</sub> surfaces show the lowest overpotentials, facilitated by undercoordinated surface oxygen atoms that favor OOH\* adsorption. Crucially, we demonstrate that the effective Bader charge of surface atoms correlates strongly with OH\* adsorption energies, enabling a direct link between electronic structure and catalytic performance. This relationship offers a predictive pathway for estimating OER overpotentials based on electronic descriptors, reinforcing the potential of *ab initio* approaches in the rational design of bifunctional catalysts.

Acknowledgment: The authors appreciate the support from FAPESP (São Paulo Research Foundation) and Shell, Grant No. 2017/11631-2 and 2018/21401-7, and the strategic importance of the support provided by ANP (Brazil's National Oil, Natural Gas, and Biofuels Agency) through the R & D levy regulation.

References:

1. KHALID, Mohammad *et al.* **J. Electroanal. Chem.**, v. 929, p. 117116, 2023.
2. NETO, Marionir MCB *et al.* **Phys. Chem. Chem. Phys.**, v. 25, n. 6, p. 4939-4949, 2023.
3. FENG, Jie *et al.* **JACS Au**, v. 3, n. 4, p. 1131-1140, 2023.