

Segunda-Feira, 9 de Agosto de 2010	
Chegada dos participantes, registro e verificação do hardware/software dos laptops	
Terça-Feira, 10 de Agosto de 2010	
8:30 - 8:45	Apresentação
8:45 - 9:00	Apresentação do Workshop - Roland Lindh
9:00 - 10:00	Aula 1: Apresentação do MOLCAS - Valera Veryazov
10:00 - 10:30	Intervalo
10:30 - 11:15	Aula 2: Conjuntos Base, CD/RI - Roland Lindh
11:15 - 12:00	Aula 3: Uso de Simetria, HF, DFT - Valera Veryazov e Per-Ake Malmqvist
12:00 - 13:30	Almoço
13:30 - 15:00	Lab 1: Instalação do MOLCAS, testes, ferramentas, etc.
15:00 - 15:30	Intervalo
15:30 - 16:30	Aula 4: Métodos Multiconfiguracionais (CASSCF e CASPT2) - Roland Lindh
16:30 - 17:30	Lab 2: Cálculos de energia: SCF e DFT
17:30 - 19:00	Lab 3: Cálculos de energia: CASSCF e CASPT2
Quarta-Feira, 11 de Agosto de 2010	
9:00 - 10:00	Aula 5: Otimizações de geometrias, com ou sem restrições - Roland Lindh
10:00 - 10:30	Intervalo
10:30 - 12:30	Lab 4: Otimizações de estruturas (mínimos, Hessians)
12:30 - 14:00	Almoço
14:00 - 15:00	Aula 6: Cálculos relativísticos - Per Ake Malmqvist
15:00 - 15:30	Intervalo
15:30 - 17:00	Lab 5: Otimizações de estruturas (estados de transição, reações, vínculos)
17:00 - 17:30	Aula 7: Molcas para usuários avançados - Valera Veryazov
17:30 - 19:00	Lab 6: Molcas como plataforma de desenvolvimento - Adicionando códigos ao MOLCAS

Quinta-Feira, 12 de Agosto de 2010	
9:00 - 10:00	Aula 8: Estados excitados - Luis Serrano-Andrés
10:00 - 10:30	Intervalo
10:30 - 12:30	Lab 7: Estados excitados (SA-CASSCF, CASPT2)
12:30 - 14:00	Almoço
14:00 - 15:00	Lab 8: Estados excitados e simetria
15:00 - 15:30	Intervalo
15:30 - 17:00	Lab 8: continuação
17:00 - 17:30	Lab 9: Estados excitados (otimizações, cruzamentos, caminhos de menor energia)
17:30 - 19:00	Lab 10: Estados excitados CASSI, SOC
Sexta-Feira, 13 de Agosto de 2010	
9:00 - 9:30	Aula 9: QM/MM - Roland Lindh
9:30 - 10:30	Aula 10: Modelos para solventes - Luis Serrano-Andrés
10:30 - 11:00	Intervalo
11:00 - 12:30	Lab 11: Modelos para solventes (estados fundamental e excitados)
12:30 - 14:00	Almoço - Foto do Grupo
14:00 - 15:00	Aula 11: Lidando com problemas (convergência, seleção de orbitais)
15:00 - 15:30	Conclusões
15:00 - 16:00	Discussões de casos