

Grupos de Pesquisa

Grupo de Pesquisa em Física Computacional (GPFC)

Lider: Dr. Mauro Lúcio Franco

[Grupo de Estudos e Pesquisas em Educação Matemática - GEPEMA](#)

Projetos em Desenvolvimento

Projeto de pesquisa: Estudos Conformacionais e Correção Térmica em Moléculas do tipo:Cicloalcanos e etano-substituídos.

Coordenador: Dr. Mauro Lúcio Franco

Resumo: Uso de métodos *ab initio* de mecânica quântica em conjunto com o formalismo da termodinâmica estatística aplicado em moléculas do tipo:cíclicas e etano-substituídos com o interesse de prever propriedades termodinâmicas macroscópicas. A inclusão da correção térmica para o cálculo teórico das propriedades termodinâmicas através das funções partição translacional, rotacional e vibracional para moléculas na fase gás, podem proporcionar uma comparação direta e um bom acordo com os dados experimentais.

Projetos Concluídos

