

Para deferimento da matrícula de alunos especiais é necessário que o(a) aluno(a) encaminhe eletronicamente (posquimica@cefetmg.br) ou fisicamente (Av. Amazonas, 5855 - Gameleira, Belo Horizonte - MG, 30510-000), dentro do prazo de matrícula 30/07/2019 a 08/08/2019, o requerimento de matrícula (anexo) devidamente preenchido e assinado, bem como cópia de toda documentação discriminada neste requerimento.

Disciplinas que serão oferecidas no CEFET-MG 2019-02:

FÍSICO-QUÍMICA AVANÇADA (04 cr)

Responsável: prof. Paulo Ortega

Horário: terças-feiras de 08:00 -11:30h

Modalidade: à distância por webconferência.

Início das aulas: 13/08/2019.

Ementa: Sistemas gasosos, desvios da idealidade, o fluido de Van der Waals e modelos baseados em equações cúbicas. Trabalho, calor e energia. Processos reversíveis, quase estáticos e a reversibilidade prática. Potenciais termodinâmicos no limite da reversibilidade, relações de Maxwell e as equações termodinâmicas de estado. Equipartição da energia e o conceito de modos energéticos ativados pela temperatura característica. Fundamentos da estatística de partículas (Bósons, Férmions e Boltzmanions) e a função de partição molecular para sistemas gasosos elementares segundo os conceitos da termodinâmica estatística. A interpretação teórica da capacidade calorífica dos sólidos segundo Einstein e Debye. Interação entre partículas, interpretação teórica do segundo coeficiente da equação de Kammerling-Onnes (série do virial) e o poço de potencial de Lennard-Jones. Teoria das reações químicas e os fundamentos mecânico estatísticos da teoria da velocidade absoluta (complexo ativado) para o processo bimolecular simples em fase gasosa. Relação entre termodinâmica e cinética segundo a interpretação de Eyring.

Bibliografia:

- 1) D A Macquerie, J D Simon, Physical Chemistry: A Molecular Approach, University Science Books, 1997.
- 2) I Levine, Physical Chemistry, 6 ed., McGraw – Hill, 2009.
- 3) W J Moore, Physical Chemistry, 5 ed, Editora Longman, 1980.
- 4) S M Blinder, Advanced Physical Chemistry, Macmillan, 1969.
- 5) E D Kaufman, Advanced Concepts in Physical Chemistry, McGraw-Hill, 1966.

QUÍMICA QUÂNTICA E MÉTODOS DE ESTRUTURA ELETRÔNICA (04 cr)

Responsável: prof. Breno Galvão

Horário: quintas-feiras de 13:50 - 17:30h

Modalidade: à distância por webconferência.

Início das aulas: 22/08/2019.

Ementa: Equação de Schrodinger. Hamiltoniano Molecular. Unidades Atômicas. Aproximação de Born-Oppenheimer. Teoria de Hartree-Fock. Orbitais Moleculares, abordagem químico-quântica e aplicações. Princípio Variacional. Métodos de correlação eletrônica. Teoria de perturbações. Teoria do Funcional da Densidade. Introdução a softwares utilizados na Química Computacional. Aplicações de métodos de estrutura eletrônica.

Bibliografia:

- 1) L Pauling, B Wilson Jr, Introduction to Quantum Mechanics, Dover, 1985.
- 2) A Yariv, Quantum Electronics, 3 ed, WILEY, 1989.
- 3) P Atkins, R Friedman, Molecular Quantum Mechanics, University Press, 2008.
- 4) N H Morgon, K Coutinho, Métodos de Química Teórica e Modelagem Molecular, Livraria da Física, São Paulo, 2007.
- 5) F Jensen, Introduction to Computational Chemistry, 2 ed, Wiley, 1999.
- 6) C J Cramer, Essentials of Computational Chemistry: Theories and Models, 2 ed, Wiley, 2004.
- 7) Artigos específicos sobre aplicações da química quântica.