

SÚMULA DA DISCIPLINA

1. Identificação

Código e nome da disciplina: QUP 011 – Química Teórica Avançada Clássica

Professor responsável: Paulo Augusto Netz

Nível: Mestrado e Doutorado

Carga horária: 45 h

Créditos: 3 (três)

Revisado e atualizado em: Agosto_2019

2. Ementa

Fundamentos da Mecânica Clássica e Estatística. Termodinâmica estatística em diferentes conjuntos. Termodinâmica Estatística de Gases e Líquidos Reais. Dinâmica Molecular, implementação computacional e aplicações de dinâmica molecular, processos de Markov, Método de Monte Carlo. Dinâmica browniana, métodos híbridos.

3. Objetivo

Fornecer aos alunos os fundamentos teóricos envolvidos em experimentos computacionais clássicos, como a dinâmica molecular, Monte Carlo e outros métodos.

4. Conteúdo Programático

- Mecânica Clássica: Condições Iniciais, Equações de Movimento, Separação de Graus Moleculares de Liberdade
- Mecânica Estatística: Conjuntos, Função de Partição, Funções de Distribuição.
- Termodinâmica estatística em diferentes conjuntos, transformações entre conjuntos,
- Interações intermoleculares. Termodinâmica Estatística de Gases e Líquidos Reais.
- Simulação Computacional Determinista: fundamentos da Dinâmica Molecular. MD nos conjuntos NVE, NVT e NPT. Detalhes metodológicos, implementação, aplicações computacionais, métodos avançados.
- Fundamentos do método de Monte-Carlo. Cadeias de Markov, ergodicidade, regras de aceitação. Implementação computacional. MC em diferentes conjuntos.
- Aplicações e métodos avançados.

5. Avaliação

Lista de exercícios, apresentação e discussão de artigos científicos, provas teóricas e/ou trabalhos dirigidos. Será considerado aprovado o aluno que obtiver conceito final A, B ou C, atribuídos conforme relação abaixo:

A - Ótimo (90 a 100%)

B - Bom (75% a 89%)

C - Regular (60 a 74%)

D - Insuficiente (abaixo de 60%)

FF - Sem frequência

6. Método de Trabalho/Ensino

Aulas teórico-expositivas e exercícios dirigidos.

7. Bibliografia

- N. Davidson, Statistical Mechanics, McGraw-Hill, 1962.
- D. A. McQuarrie, Statistical Mechanics, Harper & Row, 1976.
- A. Maczek, Statistical Thermodynamics, Oxford University Press, 1999.
- D. A. McQuarrie e J. T. Simon, Physical Chemistry: A Molecular Approach, University Science Books, 1997.
- M. P. Allen e D. J. Tildesley, Computer Simulation of Liquids, Clarendon Press, 1987.
- D. Frenkel e B. Smith, Understanding Molecular Simulation: From Algorithms to Applications, Academic Press, 1996.
- D. C. Rapaport, The Art of Molecular Dynamics Simulation, Cambridge University Press, 1997.
- A. R. Leach, Molecular Modelling: Principles and Applications, Addison-Wesley, 1997.
- K. Binder e D. W. Heermann, Monte Carlo Simulation in Statistical Physics: An Introduction, 3ª Ed., Springer Verlag, 1998.
- H. J. C. Berendsen, Simulating the Physical World, Cambridge, 2007.
- N. H. Morgon e K. Coutinho, Métodos de Química Teórica e Modelagem Molecular, Ed. Livraria da Física, 2008.
- Referências de artigos científicos especializados em Química teórica e computacional.