



UNIVERSIDADE FEDERAL RURAL DO RIO DE JANEIRO
DECANATO DE ENSINO DE GRADUAÇÃO
DEPARTAMENTO DE ASSUNTOS ACADÊMICOS E REGISTRO GERAL
DIVISÃO DE REGISTROS ACADÊMICOS

PROGRAMA ANALÍTICO

DISCIPLINA

CÓDIGO: IT-1317

**TÓPICOS ESPECIAIS EM ENGENHARIA QUÍMICA:
SIMULAÇÃO MOLECULAR APLICADA À ENGENHARIA
QUÍMICA**

CRÉDITOS: 2

DEPARTAMENTO DE ENGENHARIA QUÍMICA

INSTITUTO DE TECNOLOGIA

OBJETIVO DA DISCIPLINA: Introduzir conceitos básicos de termodinâmica estatística e sua relação com a simulação molecular. Prover entendimento de como propriedades macroscópicas de um sistema em equilíbrio estão conectadas ao comportamento microscópico desse sistema. Promover ao aluno a possibilidade de utilizar a simulação molecular como ferramenta em seus projetos de pesquisa.

EMENTA: Potenciais de interação entre moléculas e átomos, conceitos básicos de termodinâmica e mecânica estatística, dinâmica molecular em equilíbrio, dinâmica molecular em não-equilíbrio, equilíbrio de fases utilizando simulação molecular.

CONTEÚDO PROGRAMÁTICO:

- 1) Potenciais de interação “inter” e intramoleculares;
- 2) Conceitos básicos de termodinâmica e mecânica estatística:
 - a) Revisão: Mecânica Newtoniana clássica, termodinâmica e conceitos de matemática;
 - b) Ensembles canônico, microcanônico e grande canônico;
 - c) Ergodicidade e flutuações de um sistema;
 - d) Função de distribuição radial;
 - e) Funções de correlação temporal e propriedades de transporte;
- 3) Dinâmica molecular em equilíbrio:
 - a) Equação do movimento para sistemas atômicos;

- b) O algoritmo de integração *velocity-verlet*;
 - c) Dinâmica molecular de corpos não esféricos: moléculas lineares e não-lineares;
 - d) Termostatos e barostatos;
 - e) Determinação de propriedades de interesse utilizando dinâmica molecular: entalpia de vaporização, massa específica, capacidade calorífica, condutividade térmica, coeficiente de difusão, viscosidade;
 - f) Análise de erros em propriedades utilizando simulação molecular;
- 4) Dinâmica molecular em não-equilíbrio: Algoritmos de simulação para sistemas para sistemas fora do equilíbrio;
- 5) Cálculo de energia livre e equilíbrio de fases.

BIBLIOGRAFIA:

- 1) FRENKEL, D., SMIT, B., **Understanding Molecular Dynamics Simulations: from algorithms to applications**, 2 ed., Academic Press, 2001.
- 2) RAPAPORT, D.C., **The Art of Molecular Dynamics Simulation**, 2 ed. New York, Cambridge University Press, 2004.
- 3) HAILE, J. M., **Molecular dynamics simulation: Elementary Methods**, 1 ed. New York, John Wiley & Sons, 1992.
- 4) ALLEN, M.P., TILDESLEY, D.J., **Computer Simulation of Liquids**, Reprint Edition, Clarendon Press, 1989.
- 5) McQuarrie, D., **Statistical Mechanics**, University Science Books, 2000.
- 6) HILL, T., **An Introduction to Statistical Thermodynamics**, Dover Publications, 1987.