



UNIVERSIDADE FEDERAL RURAL DO RIO DE JANEIRO
PRÓ-REITORIA DE PESQUISA E PÓS-GRADUAÇÃO
SECRETARIA ACADÊMICA DE PÓS-GRADUAÇÃO

PROGRAMA ANALÍTICO

DISCIPLINA

Código: IT-1347	Nome: Termodinâmica Estatística e Simulação Molecular
	Carga Horária Total: 04 créditos, 60T

**Cada crédito Teórico corresponde a 15 horas-aula e cada Prático a 30 ou 45 horas.*

DEPARTAMENTO DE ENGENHARIA QUÍMICA
INSTITUTO DE TECNOLOGIA

OBJETIVOS:

Abordagem teórica dos fundamentos da termodinâmica estatística para descrição de sistemas microscópicos, e sua conexão com a termodinâmica clássica. Aplicação prática utilizando simulação molecular para cálculo de propriedades macroscópicas a partir de propriedades microscópicas do sistema.

EMENTA:

Ensembles estatísticos e a termodinâmica; Gases ideais; Mecânica estatística clássica e sistemas moleculares; Dinâmica molecular em equilíbrio; Dinâmica molecular em não-equilíbrio; Método de Monte Carlo; Cálculos de energia livre e de equilíbrio de fases.

CONTEÚDO PROGRAMÁTICO:

Ensembles estatísticos e a termodinâmica .Probabilidade e estatística; .Distribuição de probabilidades e estados microscópicos; .Ensembles e funções de partição canônica, grande canônica, microcanônica e de Gibbs; .Flutuações em sistemas microscópicos; .Interpretação microscópica da entropia; .Equivalência termodinâmica de ensembles;

Gases ideais .Estados de energia e a função de partição do ensemble canônico; .Função de partição translacional; .Funções termodinâmicas; .Graus de liberdade internos.

Mecânica estatística clássica e sistemas moleculares .Função de partição clássica; .Espaços de fase e equação de Liouville; .Teorema de Equipartição de energia; .Distribuição de velocidade de Maxwell-Boltzmann; .Propriedades/quantidades estruturais.

Dinâmica molecular em equilíbrio .Equação do movimento para sistemas atômicos; .O algoritmo de integração velocity-verlet; .Dinâmica molecular de corpos não esféricos: moléculas lineares e não-lineares; .Termostatos e barostatos; .Determinação de propriedades termodinâmicas e de transporte utilizando dinâmica molecular .Análise de erros em propriedades calculadas utilizando simulação molecular.

Dinâmica molecular em não-equilíbrio: Algoritmos de simulação para sistemas fora do equilíbrio. Simulação utilizando método de Monte Carlo .Amostragem de importância; .Algoritmo de

Metropolis; .Método de Monte Carlo em diferentes ensembles; .Determinação de propriedades termodinâmicas;
Cálculos de energia livre e de equilíbrio de fases

METODOLOGIA:

Aulas expositivas, trabalhos, seminários, provas.

BIBLIOGRAFIA: *(usar normas ABNT para as citações)*

ALLEN, M.P., TILDESLEY, D.J., Computer Simulation of Liquids, Reprint Edition, Clarendon Press, 1989.

FRENKEL, D., SMIT, B., Understanding Molecular Dynamics Simulations: from algorithms to applications, 2 ed., Academic Press, 2001.

HAILE, J. M., Molecular dynamics simulation: Elementary Methods, 1 ed. New York, John Wiley & Sons, 1992.

HILL, T., An Introduction to Statistical Thermodynamics, Dover Publications, 1987.

McQuarrie, D., Statistical Mechanics, University Science Books, 2000.

RAPAPORT, D.C., The Art of Molecular Dynamics Simulation, 2 ed. New York, Cambridge University Press, 2004.