



Relação de Disciplinas

41010020 Programa de Pós-Graduação em Física ME

Disciplina	Nome da Disciplina	Créditos			Situação
		T	TP	P	
FSC410061	TÓPICOS ESPECIAIS EM FÍSICA C: Introdução à Dinâmica Molecular Clássica Ementa: Estudo das técnicas utilizadas em dinâmica molecular clássica mediante a implementação e análise dos trabalhos de L. Verlet relativos a experimentos computacionais em fluídos clássicos. Objetivo: Resolver numericamente as equações de movimento de um conjunto de N partículas. Calcular suas propriedades dinâmicas e termodinâmicas. Implementar termostatos diversos considerando suas limitações teóricas. Conteúdo programático: 1. Revisão de Mecânica Clássica, Termodinâmica Estatística 1.1. Noções da teoria de probabilidade. 1.2. Leis de Newton. 1.3. Coordenadas generalizadas. 1.4. Momentos generalizadas. 1.5. Equações de Lagrange. 1.6. Equações de Hamilton. 1.7. Espaço de fase. 1.8. Definições básicas. 1.9. Leis da termodinâmica. 1.10. Potenciais termodinâmicos. 1.11. Entropia e temperatura. 1.12. O teorema ergódico. 1.13. Distribuição de Maxwell-Boltzmann. 1.14. Equiparação de energia. 1.15. Ensembles canônico, grande canônico, microcanônico. 1.16. Relações entre as funções de partição e a termodinâmica. 1.17. Função de partição semi-clássica. 1.18. Relações com equações de estado. 1.19. Flutuação, cálculo de propriedades macroscópicas a partir das flutuações microscópicas: técnicas de Green-Kubo. 2. Revisão de conceitos de programação: Fortran 95. 2.1. Definição de variáveis. 2.2. Matrizes estáticas e dinâmicas. 2.3. Decisão. 2.4. Repetição. 2.5. Entrada e saída de dados. 2.6. Subrotinas. 3. Introdução à dinâmica molecular. 3.1. Um pouco de história. 3.2. Classificação: teoria, experimento, ambos ou nenhum. 3.3. Limitações do método. 3.4. Potenciais de interação. 4. Implementação inicial. 4.1. Unidades reduzidas. 4.2. Inicialização. 4.3. Condições periódicas. 4.4. Truncamento do potencial. 4.5. Cálculo da força. 5. A dinâmica molecular. 5.1. Integração numérica e o método das diferenciais finitas. 5.1.1. Os algoritmos chamados de Verlet: clássico, velocity e leap-frog. 5.1.2. Preditor corretor. 5.1.3. Outros.	4	0	0	Ativo



Relação de Disciplinas

41010020 Programa de Pós-Graduação em Física ME

Disciplina	Nome da Disciplina	Créditos			Situação
		T	TP	P	
	5.2. Lista de vizinhos. 5.3. Soma de Ewald. 5.4. O algoritmo SHAKE. 5.5. Dinâmica de esferas duras. 6. A dinâmica em vários ensembles. 6.1. Dinâmica molecular a temperatura constante. 6.1.1. Nosé-Hoover. 6.1.2. Andersen. 6.1.3. Berendsen. 6.1.4. Langevive. 6.2. Dinâmica molecular a pressão constante. 6.2.1. Andersen. 6.2.2. Evans-Morris. 6.2.3. Berendsen. 7. Resultados. 7.1. Função de correlação, algoritmo de ordem N. 7.2. Estimativa de erro. 7.3. Coeficientes de transporte. 7.4. Python como ferramenta de análise de dados. 7.4.1. Expressões regulares. 8. Dinâmica molecular fora do equilíbrio - NEMD. 8.1. Fluxo de cisalhamento. 8.2. Fluxo de calor. 8.3. Difusão. 9. Software comerciais. 9.1. LAMMPS. 9.2. HOOMD. 9.3. JMol.				