



**MINISTÉRIO DA EDUCAÇÃO
UNIVERSIDADE FEDERAL DE PELOTAS
PRÓ-REITORIA DE GRADUAÇÃO**

PLANO DE ENSINO

Ano	Semestre letivo
2018	01

1. Identificação			Código
1.1 Disciplina: Introdução à Dinâmica Molecular de Sistemas Físicos			0090174
1.2 Unidade: Instituto de Física e Matemática			03
1.3 Responsável: Departamento de Física			09
1.4 Curso(s) atendido(s)/semestre do curso: Bacharelado em Física/3			2910
1.5 Professor regente: Alexandre Diehl			
1.6 Carga horária total: 68		1.8 Caráter: () obrigatória (X) optativa () outro (especificar):	1.9 Currículo: (X) semestral () anual
Teórica: 51	Prática: 17		
Exercícios: 0	EAD: 0		
1.7 Créditos: 04			
1.10 Local/horário Sala 113 do Prédio 16 do Instituto de Física e Matemática / 321-322-323-324			
1.11 Pré-requisito(s): Programação Computacional para a Física (0090138)			

2. Docência				
Professor(es)	2.1 Encargo didático semanal	Teórica	Prática	Total
	1. Alexandre Diehl	3	1	4
	2.2.Observações:			

3. Ementa
Fundamentos da modelagem molecular. As bases da Dinâmica Molecular. Aplicações para sistemas físicos

4. Objetivos
<p>4.1. Gerais</p> <p>Introduzir o aluno no uso da metodologia de simulação em Dinâmica Molecular, apresentando as potencialidades de uso da técnica na pesquisa em física a nível molecular.</p>
<p>4.2. Específicos</p> <p>Reconhecer os fundamentos e técnicas básicas usadas na Dinâmica Molecular. Aplicar tais conhecimentos à simulação computacional de sistemas físicos simples; ter as bases para o aprofundamento na técnica, em especial em metodologias mais avançadas em Dinâmica Molecular.</p>

5. Metodologia de ensino
<p>O programa será desenvolvido através de aulas presenciais teóricas e práticas, no laboratório de informática do Instituto de Física e Matemática, campus Capão do Leão. A exposição do conteúdo teórico utilizará quadro branco, projetor multimídia e recursos de internet. O conteúdo teórico e prático utilizará a bibliografia indicada. O conteúdo prático utilizará os recursos da plataforma Linux, tais como compiladores, navegadores, editores e processadores de textos, programas gráficos, etc, disponíveis nos computadores do laboratório de informática destinado à disciplina ou outros disponíveis na internet.</p>

6. Descrição do conteúdo/unidades (programa)

1. Fundamentos da modelagem molecular

- Introdução à modelagem molecular: justificativa e princípios básicos.
- Potenciais e forças de interação molecular: interações de van der Waals, volume excluído e eletrostáticas.
- Equação de movimento: sistema de coordenadas e unidades reduzidas.

2. As bases da Dinâmica Molecular

- Introdução à Dinâmica Molecular: histórico, princípios básicos.
- Métodos de integração da equação de movimento: Verlet, leap-frog e velocity-Verlet.
- Condições de contorno e de mínima imagem: técnicas de cálculo de interação.
- O algoritmo básico de Dinâmica Molecular: o estado inicial, a termalização e a produção de resultados.
- Cálculo de propriedades de equilíbrio e dinâmicas: médias temporais e médias de ensemble.
- Dinâmica Molecular a temperatura constante.

3. Aplicações para sistemas físicos

- Propriedades de equilíbrio de fluidos simples: energia, calor específico, distribuição de partículas.
- Propriedades dinâmicas de fluidos simples: difusão e o coeficiente de difusão.

7. Cronograma de execução

Semana	Data	Tópico abordado	Prática/teórica
1 ^a	27/03	Apresentação da disciplina. Unidade 1: Introdução à modelagem molecular: justificativa e princípios básicos. Potenciais e forças de interação molecular: interações de van der Waals, volume excluído e eletrostáticas.	00/04
2 ^a	03/04	Unidade 1: Equação de movimento: sistema de coordenadas e unidades reduzidas.	00/04
3 ^a	10/04	Unidade 1: Exercícios	04/00
4 ^a	17/04	Unidade 2: Introdução à Dinâmica Molecular: histórico, princípios básicos. Métodos de integração da equação de movimento: Verlet, leap-frog e velocity-Verlet.	01/03
5 ^a	24/04	Unidade 2: O algoritmo básico de Dinâmica Molecular: o estado inicial, a termalização e a produção de resultados.	01/03
6 ^a	01/05	Feriado	00/00
7 ^a	08/05	Unidade 2: O algoritmo básico de Dinâmica Molecular: o estado inicial, a termalização e a produção de resultados.	00/04
8 ^a	15/05	Unidade 2: Condições de contorno e de mínima imagem: técnicas de cálculo de interação.	01/03
9 ^a	22/05	Unidade 2: Condições de contorno e de mínima imagem: técnicas de cálculo de interação.	01/03
10 ^a	29/05	Unidade 2: Cálculo de propriedades de equilíbrio e dinâmicas: médias temporais e médias de ensemble.	01/03
11 ^a	05/06	Unidade 2: Cálculo de propriedades de equilíbrio e dinâmicas: médias temporais e médias de ensemble.	01/03
12 ^a	12/06	Unidade 2: Cálculo de propriedades de equilíbrio e dinâmicas: médias temporais e médias de ensemble.	01/03
13 ^a	19/06	Unidade 2: Dinâmica Molecular a temperatura constante.	01/03
14 ^a	26/06	Unidade 2: Dinâmica Molecular a temperatura constante.	01/03
15 ^a	03/07	Unidade 3: Propriedades de equilíbrio de fluidos simples: energia, calor específico, distribuição de partículas.	01/03
16 ^a	10/07	Unidade 3: Propriedades de equilíbrio de fluidos simples: energia, calor específico, distribuição de partículas.	01/03
17 ^a	17/07	Unidade 3: Propriedades de equilíbrio de fluidos simples: energia, calor específico, distribuição de partículas.	01/03
18 ^a	24/07	Unidade 3: Propriedades dinâmicas de fluidos simples: difusão e o coeficiente de difusão.	01/03

	31/07	Exame Final	
8. Atividades discentes			
Todas as atividades relacionadas com os conteúdos da disciplina serão desenvolvidos nas quatro horas semanais da disciplina, sempre na sala destinada à disciplina.			

9. Critérios de avaliação
<p>A avaliação é feita de forma qualitativa e quantitativa, através do acompanhamento da evolução dos alunos ao longo do desenvolvimento da disciplina. Por se tratar de uma disciplina de caráter teórico/prático, as atividades avaliativas versarão sobre os temas apresentados nas unidades do programa. Serão exigidos dos alunos a realização de tarefas práticas, distribuídas ao longo do semestre, cuja média aritmética simples comporá a nota N1. Além desta, a participação do aluno na disciplina será avaliada com a nota N2, calculada pelo número de suas presenças nas aulas dadas. A nota final do aluno na disciplina, denominada nota NF, será calculada a partir da equação $NF = 0,9 \cdot N1 + 0,1 \cdot N2$. A disciplina não terá prova optativa. Será considerado aprovado o aluno que obtiver nota NF igual ou maior do que 7,0. O exame final, cobrindo todo o conteúdo do programa, será aplicado para o aluno que atingir nota NF maior do que 3,0 e menor do que 7,0, com frequência de no mínimo 75%. Após o exame final será calculada a média aritmética simples entre a nota do exame e a nota NF, sendo considerado aprovado o aluno com média igual ou superior a 5,0.</p>

10. Bibliografia
<p>Básica</p> <ul style="list-style-type: none"> • ALLEN, M. P.; TILDESLEY, D. J. Computer simulation of liquids. Oxford: Clarendon, 2007. 385 p. • FRENKEL, D.; SMIT, B. Understanding Molecular Simulation: From Algorithms to Applications. 2nd Edition. Academic Press. 2002. 666 p. • RAPAPORT, D. C. The Art of Molecular Dynamics Simulation (2nd Edition). Cambridge University Press. 2013. 564 p. <p>Complementar</p> <ul style="list-style-type: none"> • SCHERER, C. Métodos Computacionais da Física. 1a Edição. Editora Livraria da Física. 2005. • TUCKERMAN, M. E. Statistical Mechanics: Theory and Molecular Simulation. Oxford: Oxford University Press. 2010. 720 p. • LEACH, A. Molecular Modelling: Principles and Applications. 2nd Edition. Pearson. 2001. 784 p. • FIELD, M. J. A Practical Introduction to the Simulation of Molecular Systems. 2nd Edition. Cambridge University Press. 2007. 344 p. • HINCHLIFFE, A. Molecular Modelling for Beginners. 2nd Edition. John Wiley&Sons. 2008. 428 p.

11. Aprovações

Os casos omissos neste Plano de Ensino serão previamente resolvidos entre os discentes e o Professor Regente, ou sob sua supervisão, e, posteriormente, pelo corpo docente da instância responsável pela disciplina.

ASSINATURAS:

Professor responsável

Professor regente

Instância responsável*

* Departamento ou colegiado ou câmara de ensino ou outra modalidade, de acordo com a estrutura administrativa de cada unidade acadêmica.

