PGF5216 – Simulação Computacional de Líquidos Moleculares
2º Semestre 2017 - Período Diurno

Disciplina: Pós-graduação
Área: Física (43134)
Docente: Kaline Coutinho (kaline@if.usp.br)

Carga horária:
Total: 180 h Teórica: 4 h Créditos: 12 Duração: 12 Semanas
Prática: 6 h Estudo: 5 h

Horário: terças e quintas das 14-16h
Início: 15 de agosto de 2017

Local: sala 207 (Ala Central no IFUSP)

Objetivos:
Neste curso serão apresentadas as técnicas tradicionais de simulação de sistemas moleculares (Dinâmica Molecular e Monte Carlo), os conceitos fundamentais de mecânica estatística, os algoritmos eficientes, técnicas avançadas de simulação e procedimentos de análise de resultados. Adicionalmente, serão desenvolvidos e/ou manuseados programas para a realização de aplicações práticas de simulações computacionais de líquidos moleculares.

Justificativa:
Sistemas moleculares, ou macromoleculares, densos e desordenados são tratados, hoje, de forma teórica e realista através das modernas técnicas de simulação computacional, que são de grande aplicabilidade nas áreas de Biofísica, Nanociência, Física de Materiais, Físico-química de soluções, Modelagem Molecular, ou em muitas áreas inter e multidisciplinares que envolvem Biologia, Química e Física. Entretanto, o conteúdo aqui proposto não está contemplado de forma sistemática e aprofundada em nenhuma outra disciplina de graduação ou pós-graduação no IFUSP. Portanto, com esta disciplina, vamos apresentar e introduzir tópicos de simulação computacional e adicionalmente faremos aplicações práticas com programas bem estabelecidos na área de Modelagem Molecular que estão disponíveis para comunidade científica.

Conteúdo:
1. Propriedades de líquidos.
2. Modelo para o potencial de interação intra e intermolecular.
3. Mecânica estatística de líquidos.
4. Método de Dinâmica Molecular.
5. Método Monte Carlo.

6. Técnicas avançadas: cálculo de energia livre, amostragem preferencial, entre outras.
7. Aplicação de simulações computacionais com método Monte Carlo e Dinâmica Molecular em sistemas modelo e realistas.
8. Análise de resultados: propriedades termodinâmicas, propriedades estruturais, erros, correções de resultados, entre outras

Bibliografia:
Textos Principais:
* Computer Simulation of Liquids, M.P. Allen and D.J. Tildesley.
* Understanding Molecular Simulation. From Algorithms to Applications, D. Frenkel and B. Smit
* Métodos de Química Teórica e Modelagem Molecular, N. H. Morgon e K. Coutinho (Eds)
Outros Textos:
* Essential of Computacional Chemistry. Theories and Models, C.J. Cramer
* Quantum Chemistry and Statistical Theory of Solutions. A Computational Approach, B.Y. Simkin and I.I. Sheikhet
* The Liquid State, D.M. Heyes * An Introduction to the Liquid State, P.A. Egelstaff
* Notas de aulas, K. Coutinho
* Programas computacionais: GROMACS e DICE

Forma de avaliação:
Textos e trabalhos.