

FICHA DE DISCIPLINA DE PÓS-GRADUAÇÃO

Sigla e título:	FQ-293 – Introdução à Simulação por Dinâmica Molecular
Acronym and title:	FQ-293 – Introduction to Molecular Dynamics Simulation

Ementa:	
----------------	--

Conceitos úteis em modelagem molecular: sistemas de coordenadas, potenciais interatômicos, potenciais intermoleculares, superfícies de potencial, superfícies moleculares, hardware e software para simulação computacional de sistemas moleculares. Modelos de campos de força empíricos para mecânica molecular: aspectos gerais; a aproximação de Born-Oppenheimer; estiramento de ligações, deformações angulares, torções diedrais, torções impróprias e deformações fora do plano; interações não ligadas, interações eletrostáticas e interações de Van der Waals; potenciais efetivos de pares. Métodos de simulação computacional por dinâmica molecular: espaço de fase, amostragem em ensembles, cálculo de médias termodinâmicas simples; equações de movimento para sistemas atômicos, algoritmos de integração de equações de movimento.

Syllabus:	
------------------	--

Useful concepts in molecular modelling: coordinate systems, interatomic and intermolecular potentials, potential energy surfaces, molecular surfaces, hardware and software for the computational simulation of molecular systems. Empirical force field models for molecular mechanics: general aspects; the Born-Oppenheimer approximation; bond stretching, angular bending, dihedral torsions, improper dihedrals and out of plane deformations; non-bonded interactions, electrostatic and Van der Waals interactions; effective pair potentials. Computational methods for molecular dynamics simulations: phase space, sampling in ensembles, calculation of simple thermodynamic means; equations of motion for atomic systems, algorithms for the integration of equations of motion.

Carga horária semanal	3-0-1-6	Crédito máximo	Até 3
------------------------------	---------	-----------------------	-------

Requisitos	Recomendado	FQ-290
	Exigido	Não há

Bibliografia recomendada	
---------------------------------	--

- | | |
|----------|---|
| 1 | LEACH, A. R. Molecular Modelling: Principles and Applications . Prentice Hall, 2001. |
| 2 | ALLEN, M. P.; TILDESLEY, D. J. Computer Simulation of Liquids . Clarendon Press, 1987. |
| 3 | Garrels, M. Bash Guide for Beginners (2nd ed.). Fultus Corporation, 2010. |

Responsável pela ementa	Luiz Fernando de Araujo Ferrão
--------------------------------	--------------------------------

Se for disciplina de leitura, indicar os alunos:	
--	--