

Conteúdo Programático, Bibliografia (indicação opcional) e Sistematização da Prova Prática (quando houver)

Edital UFRJ nº 54, de 30 de janeiro de 2024

Haverá Prova Prática: () Sim (X) Não

Unidade			
Código da Opção de Vaga	MC-196	Departamento ou Programa / Setorização Definitiva	Programa de Engenharia Química / Engenharia Molecular
Conteúdo Programático	<ol style="list-style-type: none">1. Funções de partição (Microcanônica, Canônica, Grande Canônica). Hipóteses de Gibbs, noções de ensemble, relação com a termodinâmica clássica (leis da termodinâmica). Visão microscópica da energia e da entropia. Flutuações.2. Propriedades termodinâmica em diferentes ensembles. Transformadas de Legendre. Distribuições de Boltzmann, Fermi-Dirac e Bose-Einstein. Funções de partição semiclássicas. Distribuição de Maxwell-Boltzmann.3. Métodos de Monte Carlo e de dinâmica molecular em diferentes ensembles. Funções de Correlação. Condições de contorno periódicas. Forças de curto alcance e longo alcance. Campos de força. Cálculo de coeficientes de transporte (difusão e viscosidade). Cálculo de energia livre. Cálculo de energia de solvatação.4. Termodinâmica estatística de redes: aproximação de Bragg-Williams, aproximação de Guggenheim, modelo de Flory-Huggins (soluções poliméricas). Funções de correlação. Função de distribuição radial e teoria de perturbação. Equações de estado tipo SAFT e CPA.5. Diagramas de fases e algoritmo de estabilidade. Ponto críticos, caracterização e algoritmos de cálculo. Tópicos especiais: Teoria de adsorção, Hidratos de gás. Soluções eletrolíticas. Teoria do funcional da densidade clássico (c-DFT).6. Fundamentos de Química Quântica e de Teoria do Funcional da Densidade (DFT): Equação de Schrödinger; princípio variacional; aproximação e modelo de Hartree-Fock; densidade eletrônica; teoremas de Kohn-Sham; funcionais de troca e correlação.7. Fundamentos de Química Computacional: determinação de campos de força; métodos de estrutura eletrônica; métodos de correlação eletrônica; conjuntos de base; métodos de valência.8. Cálculos de estado fundamental: energias, forças e tensões autoconsistentes; orbitais Kohn-Sham; projetor de onda aumentada (PAW); pseudopotenciais ultramacios e de norma conservada; correções de van der Waals; DFT + U, DFT + U + V; DFPT.9. Aplicações em Catálise e Termodinâmica: dinâmica molecular Car-Parrinello; dinâmica molecular de Born-Oppenheimer; método de Nudged Elastic Band (NEB); otimização de geometrias e estruturas moleculares; força de ligações; determinação e construção de superfícies de energia potencial; determinação de estados de transição; densidade de estados projetada; análise de Bader.		

	<p>10. Caracterização de materiais e interação radiação-matéria: momentos de dipolo; polarizabilidade; modelagem e previsão espectroscópicas: Raman, infravermelho, ressonância magnética nuclear, ressonância de spin eletrônico, absorção de raios X.</p>
<p>Bibliografia (indicação opcional)</p>	<ol style="list-style-type: none"> 1. Allen, M.P. e Tildesley, D.S. (2017) Computer Simulation of Liquids. Oxford Science Publications. ISBN: 978-0-19-880319-5. 2. Frenkel, D. and Smit, B. "Understand Molecular Simulations, From Algorithm to Applications Academic Press (2023). ISBN-10: 0323902928. 3. McQuarrie, D.A., Statistical Mechanics, Harper and Row Publishers, New York, 2000. ISBN-10: 1891389157. 4. Azevedo, E. G., Termodinâmica Aplicada (4ª Edição), Escolar Editora, Lisboa, 2018. ISBN-10: 9725925416. 5. Levine, I. Quantum Chemistry. Pearson, 2014. ISBN-10: 0205127703. 6. van Santen, R.A.; Neurock. M. Molecular Heterogeneous Catalysis: A Conceptual and Computational Approach. Wiley, 2006. ISBN-10: 352729662X. 7. Jensen, F. Introduction to Computational Chemistry. Wiley, 2017. ISBN-10: 1118825993. 8. Koch. W.; Holthausen, M.C. A Chemist's Guide to Density Functional Theory. Wiley, 2001. ISBN-10: 3527303723.
<p>Sistematização da Prova Prática</p>	