

**UNIVERSIDADE FEDERAL DE SANTA CATARINA
CENTRO DE CIÊNCIAS FÍSICAS E MATEMÁTICAS
DEPARTAMENTO DE FÍSICA**

Disciplina: Mecânica Estatística Computacional

Código: FSC7150

CARGA HORÁRIA: 72 horas-aula

PRÉ-REQUISITOS: FSC 5131 (Termodinâmica) e FSC 5219 (Mecânica Analítica) e FSC 5705 (Física Computacional)

EMENTA

Revisão de termodinâmica. Introdução à mecânica estatística. Método de Monte Carlo. Algoritmo de Metropolis. Modelo de Ising. Outros Algoritmos. Dinâmica molecular clássica. Potencial de Lennard-Jones. Outros ensembles.

PROGRAMA

1. Revisão de termodinâmica

- 1.1 Entropia e temperatura
- 1.2 Potenciais termodinâmicos, funções resposta
- 1.3 Sistemas magnéticos
- 1.4 Transições de fase contínuas e descontínuas

2. Introdução à mecânica estatística

- 2.1 Ensemble microcanônico. Gás ideal
- 2.2 Teorema da equipartição
- 2.3 Ensemble canônico. Paramagneto
- 2.4 Flutuações, correlações e respostas
- 2.5 Relações de Green-Kubo

3. Método de Monte Carlo

- 3.1 Métodos numéricos em processos estocásticos
 - 3.1.1 Geradores de números pseudo-aleatórios
 - 3.1.2 Caminhante aleatório
 - 3.1.3 Percolação
- 3.2 Princípios da simulação de Monte Carlo por cadeias de Markov
 - 3.2.1 Amostragem por importância e balanço detalhado
 - 3.2.2 Algoritmo de Metropolis e o modelo de Ising para o Ferromagneto
 - 3.2.3 Protocolos de equilíbrio
 - 3.2.4 Medições e erros
 - 3.2.5 Outros algoritmos: Kawasaki, Wolf e temperagem paralela
- 3.3 Outros sistemas
 - 3.3.1 Outros modelos de variáveis discretas
 - 3.3.2 Modelos com variáveis de spins contínuas
 - 3.3.3 Sistemas definidos fora da rede: partículas

4. Dinâmica Molecular

- 4.1 Métodos numéricos em equações diferenciais ordinárias
 - 4.1.1 Bilhares e esferas rígidas
 - 4.1.2 Algoritmo de Verlet
 - 4.1.3 Problema de Fermi-Pasta-Ulam-Tsingou

4.2 Princípios da simulação de dinâmica molecular

4.2.1 Potenciais de interação. Lennard-Jones.

4.2.2 Inicialização

4.2.3 Cálculo da força

4.2.4 Temperatura, pressão, difusão e funções de correlação

4.3 Outros ensembles

4.3.1 Temperatura constante: termostatos de Andersen, Nosé-Hoover e Langevin

4.3.2 Pressão constante: barostatos de Berendsen e Andersen

5. Tópicos avançados

5.1 Cálculo de médias: métodos de reamostragem

5.2 Cálculo de energia livre

5.3 Interações de longo-alcance

BIBLIOGRAFIA

NEWMAN, M. E. J. e BARKEMA, G. T. - Monte Carlo Methods in Statistical Physics. Clarendon Press. 1999.

FRENKEL, D. e SMIT, B. - Understanding Molecular Simulation: From Algorithms to Applications. Academic Press. 2001.

GOULD, H. e TOBOCHNIK, J. e CHRISTIAN, W. - An introduction to computer simulation methods: applications to physical systems - Pearson Addison-Wesley, 2006.

ALLEN, M. P. e TILDESLEY, D. J. - Computer Simulation of Liquids. Oxford University Press. 2017.