



# UNIVERSIDADE FEDERAL DE SANTA CATARINA

## FORMULÁRIO DE CRIAÇÃO DE DISCIPLINA (Art.34§ 2º Res. 95/Cun/2017)

### DELIBERAÇÃO DO COLEGIADO DELEGADO

Aprovada a criação/alteração em Reunião do Colegiado Delegado

Data da Reunião do Colegiado : 31/03/2021

Assinatura do Presidente do Colegiado Delegado: \_\_\_\_\_

### DADOS DA DISCIPLINA

**Modalidade da disciplina a propor:** Optativa

**Nome da Disciplina:** Introdução à Mecânica Estatística Computacional

**Nível a ser oferecida a disciplina:** MESTRADO e DOUTORADO

**Periodicidade a ser oferecida a disciplina:** Anual

**Área(s) de concentração vinculada:**

Mestrado: Física da Matéria Condensada e Mecânica Estatística

Doutorado: Física da Matéria Condensada e Mecânica Estatística

### CRÉDITOS e CARGA HORÁRIA (Art. 36 da Resolução 95/Cun/2017)

\*Carga horária para referência da unidade de crédito : Hora Teórica

Especifique como será distribuída a carga horária da disciplina conforme orientado abaixo:

Número de crédito(s)teórico(s):	Número de crédito(s)teórico-prático(s) ou prático(s):	Número de crédito(s) total:
4 Crédito(s)	Crédito(s)	Crédito(s)

\*Carga horária teórica: 1 crédito = 15 horas/ Carga horária teórico-prática ou prática: 1 crédito = 30 horas

### ALTERAÇÃO DE DISCIPLINAS

Alteração de disciplina\*\*:

Não

Sim

Código da disciplina a ser alterada:

JUSTIFICATIVA da ALTERAÇÃO :

\*\*A disciplina que for alterada será inativada do currículo e será criado um novo código para a disciplina com as alterações aprovadas.



# UNIVERSIDADE FEDERAL DE SANTA CATARINA

Corpo Docente Responsável :

Lucas Nicolao

Ementa:

Probabilidade. Medidas e erros. Revisão mecânica estatística e o modelo de Ising. Método de Monte Carlo. Algoritmo de Metropolis. Outros modelos e algoritmos. Revisão mecânica estatística e gases reais. Dinâmica molecular clássica. Algoritmo de Verlet. Equação de Langevin. Potencial de Lennard-Jones. Outros ensembles.

## BIBLIOGRAFIA BÁSICA

Bibliografia digital gratuita

1. P. Viot - Numerical Simulation in Statistical Physics. 2020. <https://www.lptmc.jussieu.fr/user/viot/COURS/lecture2020.pdf>
2. T.J.H. Vlugt, J.P.J.M. van der Eerden, M. Dijkstra, B. Smit, D. Frenkel - Introduction to Molecular Simulation and Statistical Thermodynamics. 2009. <http://homepage.tudelft.nl/v9k6y/imsst/index.html>

Bibliografia

1. Newman, M. E. J. e Barkema, G. T. - Monte Carlo Methods in Statistical Physics. Clarendon Press. 1999.
2. Frenkel, D. e Smit, B. - Understanding Molecular Simulation: From Algorithms to Applications. Academic Press. 2001.
3. Gould, H. e Tobochnik, J. e Christian, W. - An introduction to computer simulation methods: applications to physical systems - Pearson Addison-Wesley, 2006.
4. Allen, M. P. e Tildesley, D. J. - Computer Simulation of Liquids. Oxford University Press. 2017.

## JUSTIFICATIVA DO DOCENTE PARA A OFERTA DA DISCIPLINA

A disciplina é formativa para pós-graduandos se especializando em física estatística, e pretende apresentar os conceitos e metodologia básicos envolvendo os métodos de Monte Carlo e de Dinâmica Molecular, que são métodos de simulações numéricas que começaram a ser desenvolvidos na década de 50 e hoje já são bem estabelecidos. Essa metodologia é complementar a formação teórico-analítica, e permitirá aos estudantes



# UNIVERSIDADE FEDERAL DE SANTA CATARINA

explorar com programação conceitos como irreversibilidade, convergência ao equilíbrio térmico e transições de fase.

Data: 29/03/2021

---

Assinatura do Docente  
Responsável pela disciplina