



UNIVERSIDADE DO ESTADO DO RIO DE JANEIRO - UERJ  
INSTITUTO DE QUÍMICA  
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM ENGENHARIA QUÍMICA  
**EMENTA DE DISCIPLINA**



UNIDADE ACADÊMICA <b>Instituto de Química</b>	DEPARTAMENTO <b>Físico-Química</b>		
NOME DA DISCIPLINA <b>Introdução à Termodinâmica Estatística e Simulação Molecular</b>	<input type="checkbox"/> OBRIGATÓRIA <input checked="" type="checkbox"/> ELETIVA	C. HORÁRIA <b>45</b>	Nº CRÉDITOS <b>3</b>
NOME DO PROJETO / CURSO <b>Programa de Pós-graduação em Engenharia Química</b>	DISTRIBUIÇÃO DE CARGA HORÁRIA		
ÁREA DE CONCENTRAÇÃO <b>Processos Químicos, Petróleo e Meio Ambiente</b>	TIPO DE AULA	C. HORÁRIA	Nº CRÉDITOS
	TEÓRICA	<b>45</b>	<b>3</b>
	PRÁTICA	<b>0</b>	<b>0</b>
	TOTAL	<b>45</b>	<b>3</b>
PRÉ-REQUISITOS	<input checked="" type="checkbox"/> DISCIPLINA DO CURSO DE MESTRADO ACADÊMICO <input type="checkbox"/> DISCIPLINA DO CURSO DE MESTRADO PROFISSIONAL <input checked="" type="checkbox"/> DISCIPLINA DO CURSO DE DOUTORADO		
EMENTA Termodinâmica Estatística: Introdução. Funções de Partição. Estatística de Boltzmann. Mecânica Estatística Clássica. Gás Ideal. Gás Não-Ideal, Equação de Virial. Introdução à Teoria de Células. Introdução à Estatística de Redes Cristalinas. Função de Distribuição Radial. Teoria da Perturbação. Teoria do Funcional da Densidade (DFT). Introdução a Simulação Molecular: Método de Monte Carlo. Método da Dinâmica Molecular.			
BIBLIOGRAFIA BÁSICA – Allen, M. P. e Tildesley, D. J., Computer Simulation of Liquids, Oxford Science Publications, 1997. – Frenkel, D. e Smit, B., Understanding Molecular Simulation: From Algorithms to Applications, Academic Press, 1996. – Hill, T.L., An Introduction to Statistical Thermodynamics, Dover, 1970. – McQuarrie, D. A., Statistical Mechanics, Harper and Row, 1976. – Wu, J. Z., Density Functional Theory for Liquid Structure and Thermodynamics, V. 131, pp 1-73, Springer-Verlag Berlin Heidelberg, 2009.			
<b>COORDENADOR DO PROJETO / CURSO</b>			
RIO DE JANEIRO, ____ DE _____ DE _____.			