



DISCIPLINAS ELETIVAS
1º Semestre / 2025

DISCIPLINA	TURMA	NOME
FX113	E	Atividade de extensão: iniciação científica – ensino médio – dinâmica molecular clássica

Horas Semanais

Teóricas	Práticas	Laboratório	Orientação	Distância	Estudo em Casa	Sala de Aula
000	000	000	000	000	000	000
Nº semanas	Carga horária total		Créditos	Exame	Frequência	Aprovação
00	00		00	S	75%	N

Horário Proposto (Se houver):

Ementa:

Introdução aos métodos de dinâmica molecular clássica. Breve introdução aos programas Large-scale Atomic/Molecular Massively Parallel Simulator (LAMMPS) e Visual Molecular Dynamics (VMD). Potenciais simples: massa mola e Lennard Jones. Simulações de dois e três corpos com potenciais simples. Verificação da conservação de energia e momento linear. Introdução à estrutura e propriedades do grafeno. Simulações computacionais do grafeno.

Objetivos:

Preparar o estudante para orientar jovens do ensino médio que desejam conhecer uma ferramenta computacional usada em pesquisa de ponta na área de dinâmica molecular clássica.

Pré-Requisito na Graduação (se houver):

F 315 ou equivalente.

Programa:

Critérios de Avaliação (alunos de Graduação):

Monografia, notas de aulas para estudantes do ensino médio e slides com apresentação de resultados.

Bibliografia:

Principal:

- Molecular Dynamics Simulations – Elementary Methods, J. M. Haile, John Wiley & Sons Inc., New York, 1997;

Consulta:

- Understanding Molecular Simulations – From Algorithms to Applications, D. Frenkel and B. Smith, Academic Press, San Diego, 2002;



DISCIPLINAS ELETIVAS
1º Semestre / 2025

- Molecular Modeling and Simulation – An Interdisciplinary Guide, T. Schlick, Springer, New York, 2002.
- J. E. D.Vieira Segundo, E. O. Vilar “Grafeno: Uma revisão sobre propriedades, mecanismos de produção e potenciais aplicações em sistemas energéticos”, *Revista Eletrônica de Materiais e Processos*, v. 11, n. 2 (2016) 54–57.

Observações:

Dependendo do desempenho dos alunos desta disciplina e dos alunos do ensino médio que participarem da proposta, podemos definir pequenos projetos de pesquisa visando publicação em revistas científicas, com co-autoria de todos.