

Sylabus przedmiotu

Przedmiot:	Symulacje komputerowe
Kierunek:	Chemia, II stopień [4 sem], stacjonarny, ogólnoakademicki, rozpoczęty w: 2013
Specjalność:	chemia środków bioaktywnych i kosmetyków
Rok/Semestr:	II/3
Liczba godzin:	15,0
Nauczyciel:	Rżysko Wojciech, dr hab.
Forma zajęć:	laboratorium
Rodzaj zaliczenia:	zaliczenie na ocenę
Poziom trudności:	średnio zaawansowany
Wstępne wymagania:	Kurs chemii teoretycznej
Metody dydaktyczne:	<ul style="list-style-type: none">• ćwiczenia laboratoryjne
Zakres tematów:	<ol style="list-style-type: none">1. Symulacje Monte Carlo w zespole kanonicznym i wielkim kanonicznym.2. Symulacje dynamiki molekularnej w zespole NVE, NVT oraz NPT. Twierdzenie H.3. Wyznaczanie równania stanu z symulacji MD.4. Wyznaczanie translacyjnego parametru porządku i radialnej funkcji dystrybucji dla różnych stanów skupienia.5. Wyznaczanie współczynnika dyfuzji z MD.6. Wyznaczanie funkcji autokorelacji prędkości z MD.7. Symulacje cząsteczek. Wyznaczanie niektórych właściwości fizykochemicznych alkanów.8. Techniki symulacji komputerowych dla potencjałów długi zasięgowych. Symulacje komputerowe wody.9. Nierównowagowa dynamika molekularna. Wyznaczanie współczynnika lepkości.
Forma oceniania:	<ul style="list-style-type: none">• ćwiczenia praktyczne/laboratoryjne
Literatura:	<ol style="list-style-type: none">1. D. Frenkel, B. Smit, <i>Understanding Molecular Simulation. From Algorithms to Applications</i>. Academic Press, 2002.2. M.P. Allen, D.J. Tildesley, <i>Computer Simulation of Liquids</i>, Oxford University Press, 1987.3. D.C. Rapaport, <i>The Art of Molecular Dynamics Simulation</i>, Cambridge University Press, 2004.4. D.P. Landau, K. Binder, <i>A Guide to Monte Carlo Simulation in Statistical Physics</i>, Cambridge University Press, 2000.5. M.E.J. Newman, G.T. Barkema, <i>Monte Carlo Methods in Statistical Physics</i>, Oxford University Press, 1999.6. A. Leach, <i>Molecular Modeling. Principles and Applications</i>, Prentice Hall, 2001.
Dodatkowe informacje:	http://zmpfch.umcs.lublin.pl/