

## Sylabus przedmiotu

Przedmiot:	<b>Symulacje komputerowe</b>	
Kierunek:	Chemia, II stopień [4 sem], stacjonarny, ogólnoakademicki, rozpoczęty w: 2013	
Specjalność:	analityka chemiczna	
Tytuł lub szczegółowa nazwa przedmiotu:	Symulacje komputerowe - wykład	
Rok/Semestr:	II/3	
Liczba godzin:	15,0	
Nauczyciel:	<b>Bryk Paweł, dr hab.</b>	
Forma zajęć:	wykład	
Rodzaj zaliczenia:	egzamin	
Punkty ECTS:	2,0	
Godzinowe ekwiwalenty punktów ECTS (łącznie liczba godzin w semestrze):	0 Godziny kontaktowe z prowadzącym zajęcia realizowane w formie konsultacji 0 Godziny kontaktowe z prowadzącym zajęcia realizowane w formie zajęć dydaktycznych 0 Przygotowanie się studenta do zajęć dydaktycznych 0 Przygotowanie się studenta do zaliczeń i/lub egzaminów 0 Studiowanie przez studenta literatury przedmiotu	
Poziom trudności:	Średnio zaawansowany	
Wstępne wymagania:	kurs chemii teoretycznej	
Metody dydaktyczne:	<ul style="list-style-type: none"> <li>wykład informacyjny</li> </ul>	
Zakres tematów:	<ol style="list-style-type: none"> <li>Sposoby modelowania materii w zależności od skal czasowych i rozmiarowych. Modelowanie wieloskalowe.</li> <li>Metoda Monte Carlo. Próbkowanie ważone. Procesy Markowa. Równowaga szczegółowa. Algorytm Metropolisa.</li> <li>Symulacje Monte Carlo w różnych zespołach statystycznych.</li> <li>Dynamika molekularna. Algorytmy całkowania równań ruchu.</li> <li>Rodzaje termostatów w dynamice molekularnej.</li> <li>Potencjały oddziaływań międzycząsteczkowych oraz pola siłowe używane w symulacjach komputerowych.</li> <li>Techniki symulacji układów z siłami długozasięgowymi. Symulacyjne modele wody.</li> <li>Jednostki używane w symulacjach komputerowych i sposoby ich przeliczania.</li> <li>Statyczne i dynamiczne wielkości fizykochemiczne wyznaczone z symulacji.</li> <li>Wyznaczanie równowag fazowych z symulacji komputerowych.</li> <li>Procedura upraszczania modelu. Symulacje mezoskopowe: dynamika Browna i dyssypatywna dynamika cząsteczkowa.</li> <li>Symulacje komputerowe adsorpcji w różnych materiałach adsorbcyjnych: zeolitach, MCM, nanorurkach, szklach porowatych, węglach aktywnych.</li> <li>Symulacje komputerowe białek.</li> </ol>	
Forma oceniania:	<ul style="list-style-type: none"> <li>egzamin pisemny</li> <li>egzamin ustny</li> </ul>	
Literatura:	<ol style="list-style-type: none"> <li>D. Frenkel, B. Smit, <i>Understanding Molecular Simulation. From Algorithms to Applications</i>. Academic Press, 2002.</li> <li>M.P. Allen, D.J. Tildesley, <i>Computer Simulation of Liquids</i>, Oxford University Press, 1987.</li> <li>D.C. Rapaport, <i>The Art of Molecular Dynamics Simulation</i>, Cambridge University Press, 2004.</li> <li>D.P. Landau, K. Binder, <i>A Guide to Monte Carlo Simulation in Statistical Physics</i>, Cambridge University Press, 2000.</li> <li>M.E.J. Newman, G.T. Barkema, <i>Monte Carlo Methods in Statistical Physics</i>, Oxford University Press, 1999.</li> <li>A. Leach, <i>Molecular Modeling. Principles and Applications</i>, Prentice Hall, 2001.</li> </ol>	

Dodatkowe informacje: <http://zmpfch.umcs.lublin.pl/>