

## Sylabus przedmiotu

Przedmiot:	<b>Symulacje komputerowe</b>
Kierunek:	Chemia, II stopień [4 sem], stacjonarny, ogólnoakademicki, rozpoczęty w: 2013
Specjalność:	chemia środków bioaktywnych i kosmetyków
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:	zaliczenie na ocenę
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
Wstępne wymagania:	kurs chemii teoretycznej
Metody dydaktyczne:	• wykład informacyjny
Zakres tematów:	<ol style="list-style-type: none"> <li>1. Sposoby modelowania materii w zależności od skal czasowych i rozmiarowych. Modelowanie wieloskalowe.</li> <li>2. Metoda Monte Carlo. Próbkowanie ważone. Procesy Markowa. Równowaga szczegółowa. Algorytm Metropolisa.</li> <li>3. Symulacje Monte Carlo w różnych zespołach statystycznych.</li> <li>4. Dynamika molekularna. Algorytmy całkowania równań ruchu.</li> <li>5. Rodzaje termostatów w dynamice molekularnej.</li> <li>6. Potencjały oddziaływań międzycząsteczkowych oraz pola siłowe używane w symulacjach komputerowych.</li> <li>7. Techniki symulacji układów z siłami długozasięgowymi. Symulacyjne modele wody.</li> <li>8. Jednostki używane w symulacjach komputerowych i sposoby ich przeliczania.</li> <li>9. Statyczne i dynamiczne wielkości fizykochemiczne wyznaczone z symulacji.</li> <li>10. Wyznaczanie równowag fazowych z symulacji komputerowych.</li> <li>11. Procedura upraszczania modelu. Symulacje mezoskopowe: dynamika Browna i dyssypatywna dynamika cząsteczkowa.</li> <li>12. Symulacje komputerowe adsorpcji w różnych materiałach adsorbcyjnych: zeolitach, MCM, nanorurkach, szklach porowatych, węglach aktywnych.</li> <li>13. Symulacje komputerowe białek.</li> </ol>
Forma oceniania:	• końcowe zaliczenie pisemne
Literatura:	<ol style="list-style-type: none"> <li>1. D. Frenkel, B. Smit, <i>Understanding Molecular Simulation. From Algorithms to Applications</i>, Academic Press, 2002.</li> <li>2. M.P. Allen, D.J. Tildesley, <i>Computer Simulation of Liquids</i>, Oxford University Press, 1987.</li> <li>3. D.C. Rapaport, <i>The Art of Molecular Dynamics Simulation</i>, Cambridge University Press, 2004.</li> <li>4. D.P. Landau, K. Binder, <i>A Guide to Monte Carlo Simulation in Statistical Physics</i>, Cambridge University Press, 2000.</li> <li>5. M.E.J. Newman, G.T. Barkema, <i>Monte Carlo Methods in Statistical Physics</i>, Oxford University Press, 1999.</li> <li>6. A. Leach, <i>Molecular Modeling. Principles and Applications</i>, Prentice Hall, 2001.</li> </ol>
Dodatkowe informacje:	<a href="http://zmpfch.umcs.lublin.pl/">http://zmpfch.umcs.lublin.pl/</a>