

## 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 - laboratorium
Rok/Semestr:	II/3
Liczba godzin:	15,0
Nauczyciel:	<b>Bryk Paweł, dr hab.</b>
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"><li>• ćwiczenia laboratoryjne</li></ul>
Zakres tematów:	<ol style="list-style-type: none"><li>1. Symulacje Monte Carlo w zespole kanonicznym i wielkim kanonicznym.</li><li>2. Symulacje dynamiki molekularnej w zespole NVE, NVT oraz NPT. Twierdzenie H.</li><li>3. Wyznaczanie równania stanu z symulacji MD.</li><li>4. Wyznaczanie translacyjnego parametru porządku i radialnej funkcji dystrybucji dla różnych stanów skupienia.</li><li>5. Wyznaczanie współczynnika dyfuzji z MD.</li><li>6. Wyznaczanie funkcji autokorelacji prędkości z MD.</li><li>7. Symulacje cząsteczek. Wyznaczanie niektórych właściwości fizykochemicznych alkanów.</li><li>8. Techniki symulacji komputerowych dla potencjałów długi zasięgowych. Symulacje komputerowe wody.</li><li>9. Nierównowagowa dynamika molekularna. Wyznaczanie współczynnika lepkości.</li></ol>
Forma oceniania:	<ul style="list-style-type: none"><li>• ćwiczenia praktyczne/laboratoryjne</li></ul>
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>