

Sylabus przedmiotu

Przedmiot:	Symulacje komputerowe
Kierunek:	Chemia, II stopień [4 sem], stacjonarny, ogólnoakademicki, rozpoczęty w: 2014
Specjalność:	analityka chemiczna
Tytuł lub szczegółowa nazwa przedmiotu:	Symulacje komputerowe - wykład
Rok/Semestr:	II/3
Liczba godzin:	15,0
Nauczyciel:	Bryk Paweł, dr hab.
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 15,0 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"> wykład informacyjny
Zakres tematów:	<ol style="list-style-type: none"> Sposoby modelowania materii w zależności od skal czasowych i rozmiarowych. Modelowanie wieloskalowe. Metoda Monte Carlo. Próbkowanie ważone. Procesy Markowa. Równowaga szczegółowa. Algorytm Metropolisa. Symulacje Monte Carlo w różnych zespołach statystycznych. Dynamika molekularna. Algorytmy całkowania równań ruchu. Rodzaje termostatów w dynamice molekularnej. Potencjały oddziaływań międzycząsteczkowych oraz pola siłowe używane w symulacjach komputerowych. Techniki symulacji układów z siłami długozasięgowymi. Symulacyjne modele wody. Jednostki używane w symulacjach komputerowych i sposoby ich przeliczania. Statyczne i dynamiczne wielkości fizykochemiczne wyznaczone z symulacji. Wyznaczanie równowag fazowych z symulacji komputerowych. Procedura upraszczania modelu. Symulacje mezoskopowe: dynamika Browna i dyssypatywna dynamika cząsteczkowa. Symulacje komputerowe adsorpcji w różnych materiałach adsorbcyjnych: zeolitach, MCM, nanorurkach, szklach porowatych, węglach aktywnych. Symulacje komputerowe białek.
Forma oceniania:	<ul style="list-style-type: none"> egzamin pisemny egzamin ustny
Literatura:	<ol style="list-style-type: none"> D. Frenkel, B. Smit, <i>Understanding Molecular Simulation. From Algorithms to Applications</i>. Academic Press, 2002. M.P. Allen, D.J. Tildesley, <i>Computer Simulation of Liquids</i>, Oxford University Press, 1987. D.C. Rapaport, <i>The Art of Molecular Dynamics Simulation</i>, Cambridge University Press, 2004. D.P. Landau, K. Binder, <i>A Guide to Monte Carlo Simulation in Statistical Physics</i>, Cambridge University Press, 2000. M.E.J. Newman, G.T. Barkema, <i>Monte Carlo Methods in Statistical Physics</i>, Oxford University Press, 1999. A. Leach, <i>Molecular Modeling. Principles and Applications</i>, Prentice Hall, 2001.

Dodatkowe informacje:	http://zmpfch.umcs.lublin.pl/
Modułowe efekty kształcenia:	<ul style="list-style-type: none"> 01 Opisać podstawowe metody termodynamiki statystycznej stosowane w fizykochemii 03 Opisać metody wybrane symulacji komputerowych (dynamika molekularna, metoda Monte Carlo) 04 Opisać zjawiska zachodzące na różnych granicach faz 05 Podać definicje wielkości charakteryzujących adsorpcję 06 Wykonać obliczenia stosując gotowe programy symulacyjne 07 Interpretować wyniki otrzymane przy użyciu programów symulacyjnych 08 Uświadamia sobie konieczność dalszego pogłębiania wiedzy 09 Rozumie znaczenie umiejętności efektywnego szukania informacji w naukowych bazach danych